Modélisation et Statistique Spatiales

Xavier Guyon

Modélisation et Statistique Spatiale

Atelier RASMA – Université Gaston Berger
Saint Louis du Sénégal
29 novembre – 4 décembre 2010

Xavier Guyon – SAMM -- Université Paris 1

- Géostatistique, modèle du second ordre, krigeage
- Donnée sur un réseau :
  - Auto-Régression Spatiale (SAR et CAR, SARX)
  - Champ de Gibbs – Markov – Auto modèle de Besag
  - Simulation par chaîne de Markov (MCMC)
- Processus ponctuel

Trois types de structures spatiales

Géostatistiques :

- S est un **ensemble continu** (de R**2, R**3, …)
- données **réelles,** uni ou multidimensionnelles
- Observations en n sites : s1,s2,….,sn de S.

Latticielles :

- S est un **réseau fini de sites discret** muni d'un graphe
- données réelles : modèles AR.
- ou non : champ de Markov (binaires, poisson, etc.)

Données ponctuelles

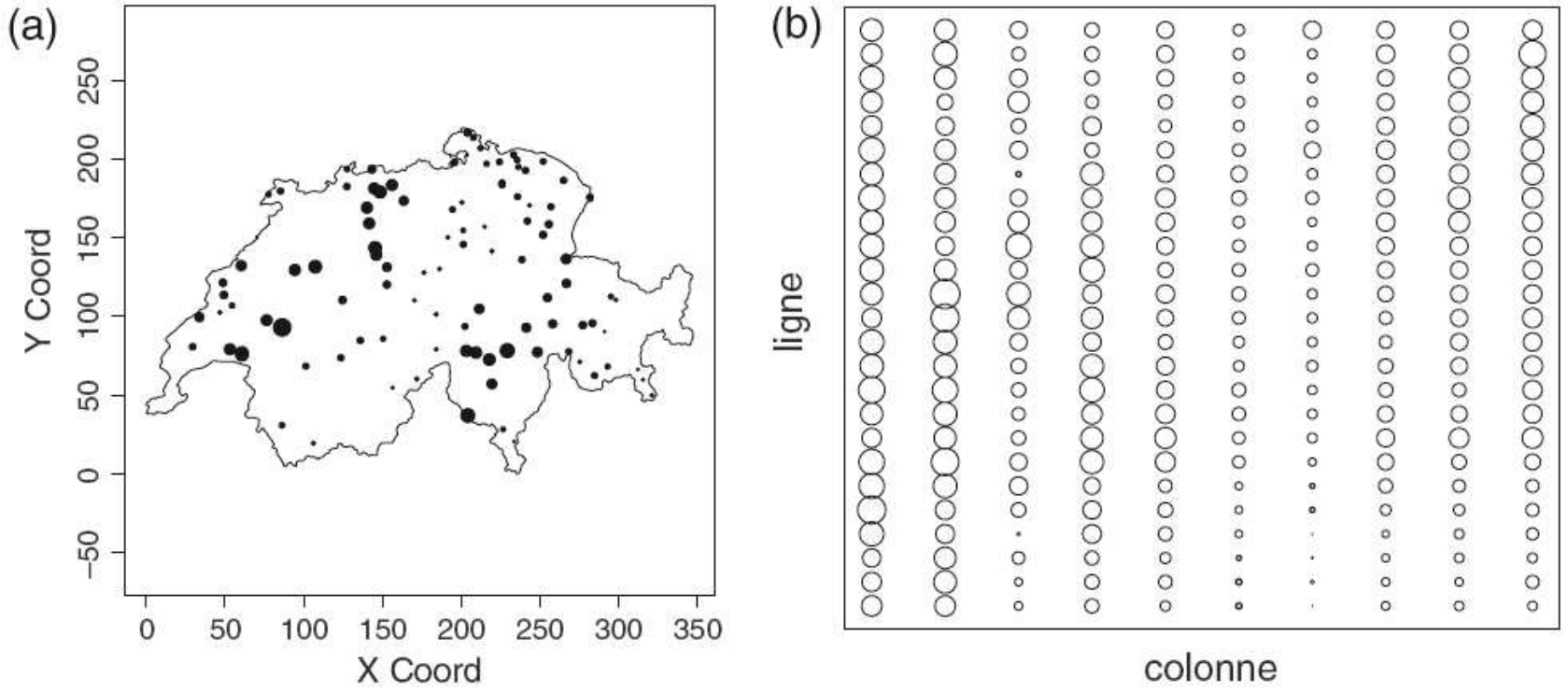
- S est un ensemble de **points aléatoires** x1,x2,…,xn de S, une partie de R**2, R**3, … (Processus Ponctuel Spatial).
- PP marqué si une marque mi attaché à chaque **xi** : épicentre d'un séisme et **mi** = intensité du séisme : {(**xi,mi**),i=1,n}.

Données géostatistiques X

(a) Cumul de pluies dans 100 stations météo suisse le jour du passage du nuage de Tchernobyl : réseau irrégulier (`sic.100` de `geoR`)

(b) Porosité d'un sol (`soil250` de `geoR`) : réseau régulier

La dimension des symboles est proportionnelle à X



Le logiciel *R*

Installation de *R* :

`http://cran.r-project.org/`

- **site miroir** : i.e. Toulouse
- Deux fenêtres : **`R Console`** (*RGui*) et **`R Graphics`**

Chargement du package *geoR* (données géo-stat)

1. Installer le package ... R (RGui ... interface ...

Données Porosité (`soil250`)

22 variables « chimiques » sur une grille régulière 10x25 points espacés de 5 mètres (cf. `soil250` dans la liste de `geoR`).

On sélectionne la coordonnées n°16, ctc (*catium exchange*)

```
> data(soil250)
> ctc <- as.geodata(soil250, data.col=16)
> plot(ctc)
```

4 graphiques

1 - les 4 quartiles (4 couleurs) de *CTC*
2 et 3 - les nuages *(ctc(x,y), y)* *et* *(x,ctc(x,y))*
4 - Histogramme de répartition des 250 valeurs de *ctc*

Conservation d'un graphique :
se placer dans la *fenêtre graphique* → historique → Ajouter (ou précédent, etc….)

Autre solution : placer la commande « `> x11()` » avant une commande graphique conservera le graphique (aller dans fenêtre, les graphiques sont numérotés séquentiellement)

Données pluviométrie Suisse

```
> print(sic.100)
> points(sic.100,borders=sic.borders)
```

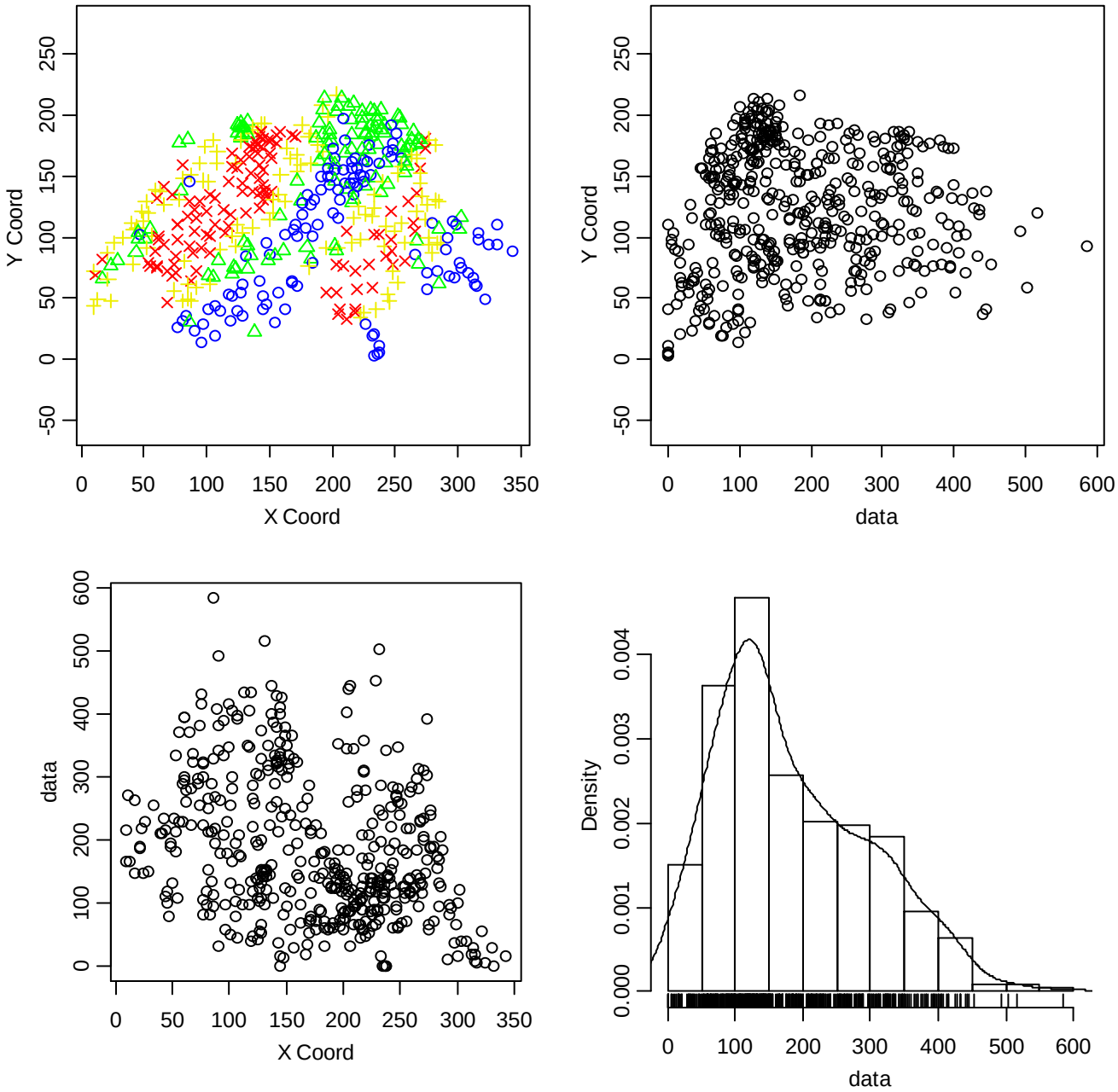
sic.borders : fichier frontière

4 données pour chaque station : coordonnées *(x,y)*, *hauteur de pluie*, *altitude*

sic.100 : 100 stations choisies au hasard dans un réseau de 367 stations

sic.all : toutes les 367 stations

```
> points(sic.all, borders=sic.borders)
> plot(sic.all)
```


Y Coord
X Coord
data
Density

Questions en Geostatistique

- **Quelle structure de corrélation spatiale** ?

- Stationnarité (covariance) , isotropie ?
- Non stationnarité (variogramme)
- Modèle avec covariables (données exogènes)

- **Estimation (validation) de modèle**

- **Prédiction** partout : carte de krigeage, simulation conditionnelle

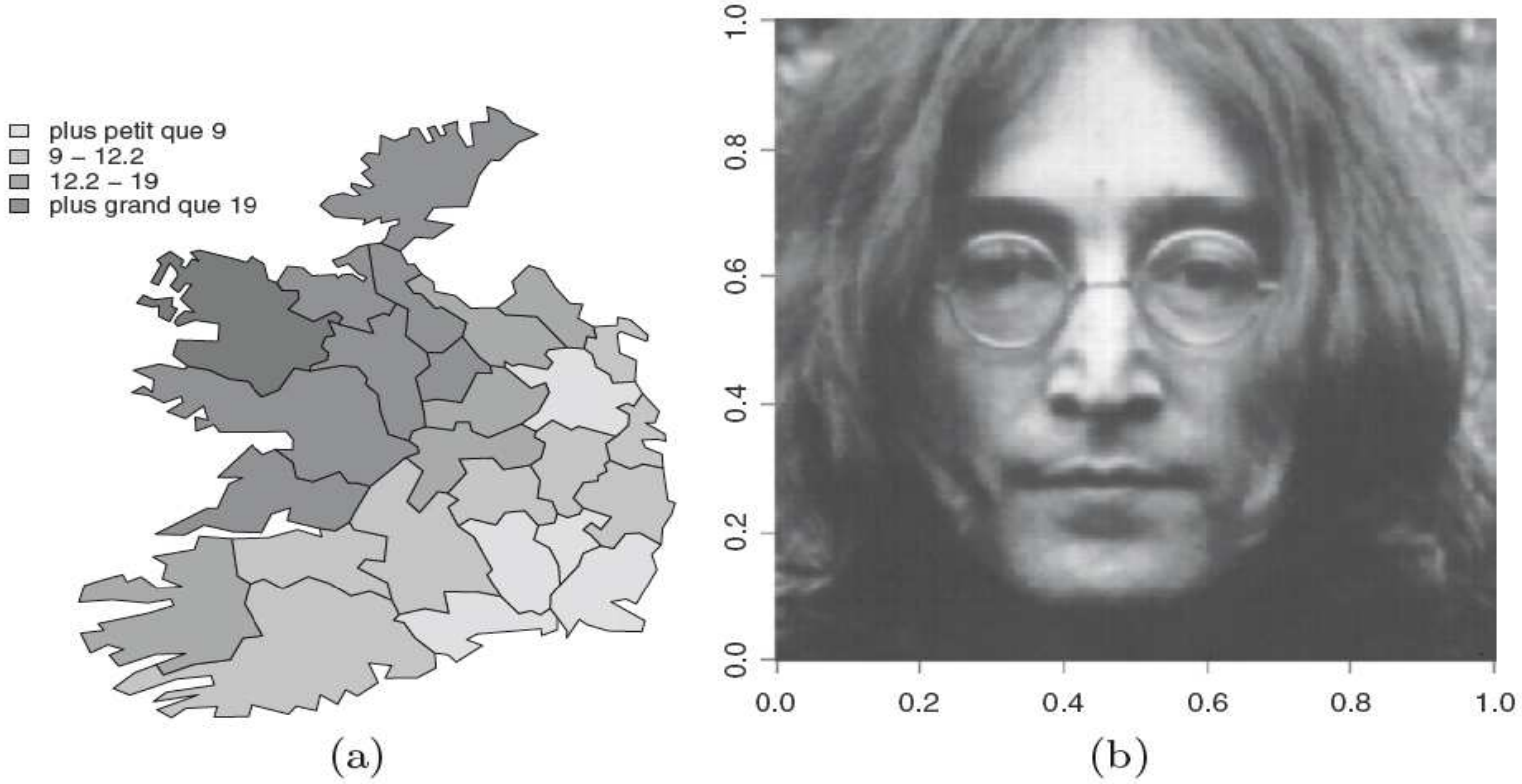
- **Outil logiciel** : *geoR*

Données réelles sur un réseau discret

(a) % groupe sanguin A dans 26 comtés Irlande *(eire, spdep)*

(b) Image 256 x 256 de J. Lennon (193 niveaux de gris, *lennon* **du package** *fields*)

→ **Packages :** *spdep, fields, …*



Pourcentage du groupe sanguin A dans les 26 comtés de l'Irlande (données *eire* de *spdep*)

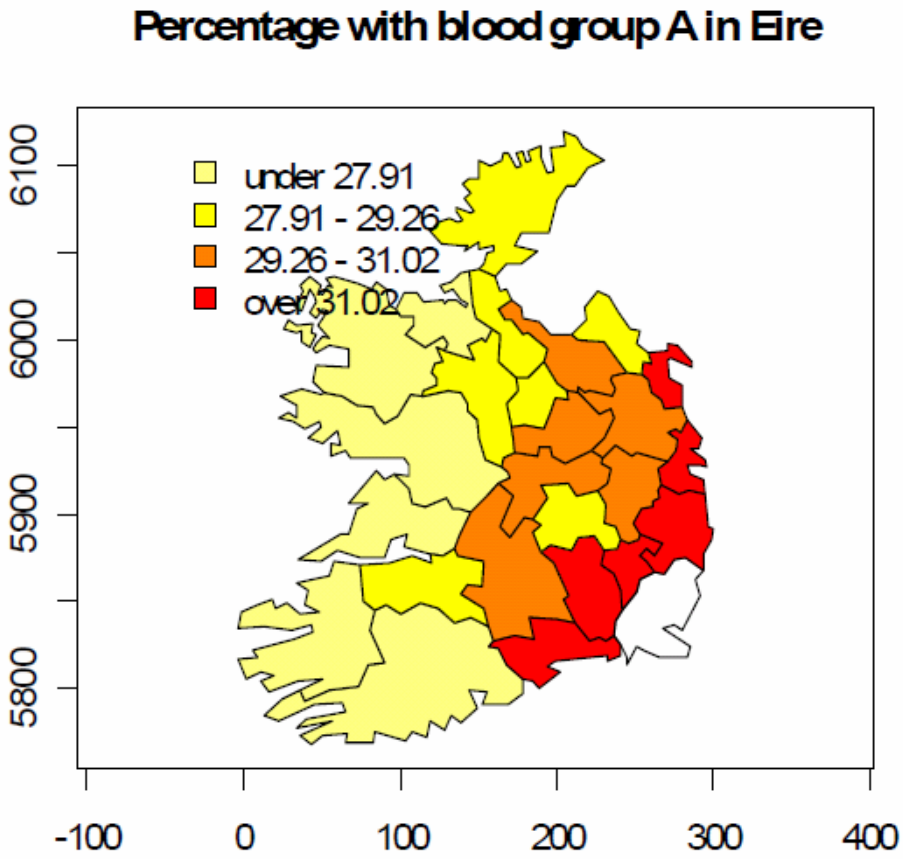
X(s) = % du groupe sanguin A dans 26 comtés.

- Graphe de contiguïté spatiale,
- Indice de Moran : t =4.66

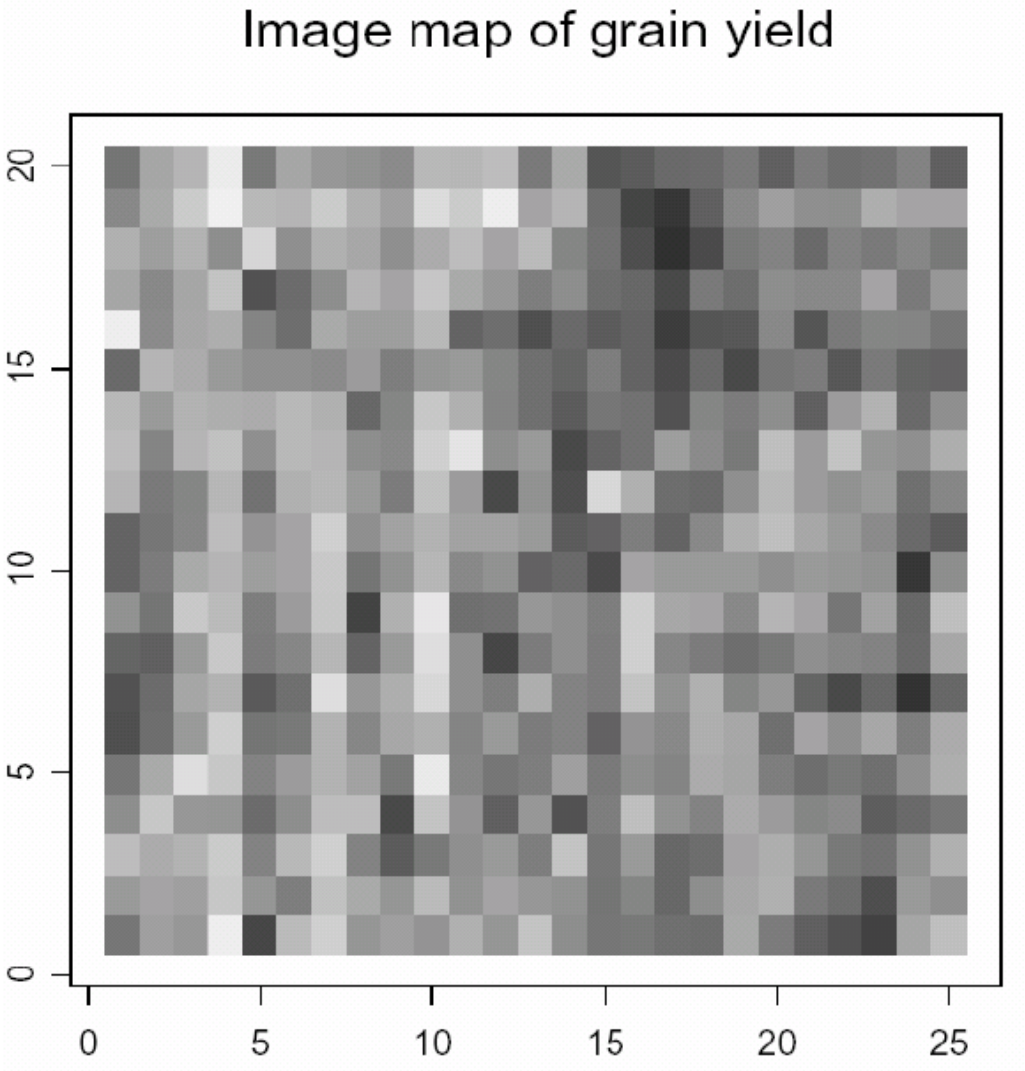
(corrélation spatiale significative).

Covariables

- *Towns :* densité urbaine,
- *Pale :* indique si le comté était sous contrôle anglo normand ou non.

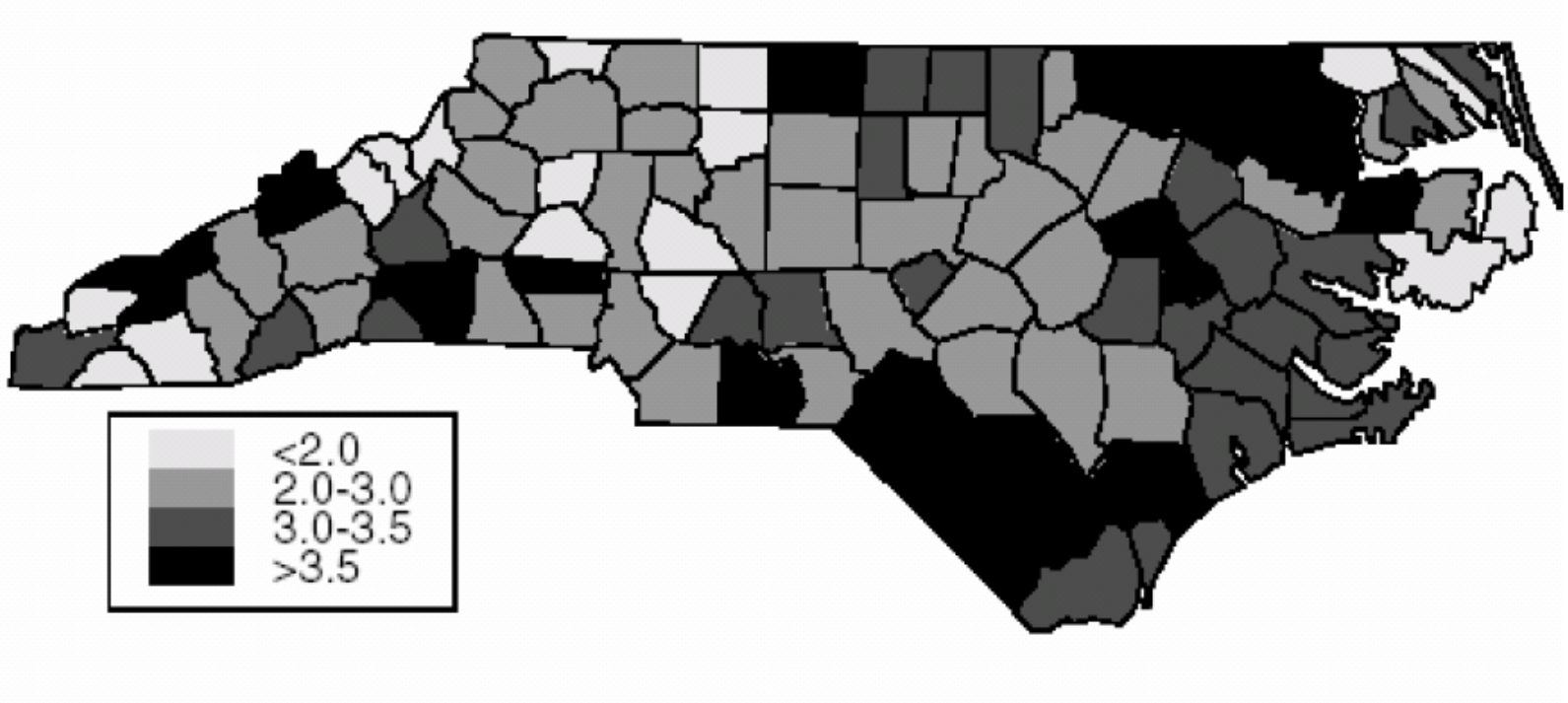


Données de Mercer et Hall : image en pixels de niveau de gris.



Données latticielles : « la mort subite du nourrisson »

Nombre de cas dans 100 comtés de Caroline du nord entre 1974-1978 (données ***sids*** de ***R***; Cressie,1993)



Questions

- **Quel modèle ?**
  - voisinages d'influence pour chaque site
  - SAR ou CAR
  - stationnaire ou non
  - avec variables exogènes (SARX)

- **Estimation et validation de modèle**
- **Tests sur les paramètres ….**

- **Outils logiciel** : *spdep, fields*, …

Données SIDS : la mort subite du nourrisson (suite)

Données : X(s) = taux de msn pour le canton s dans 100 cantons de north carolina, (1974-78), réelles.

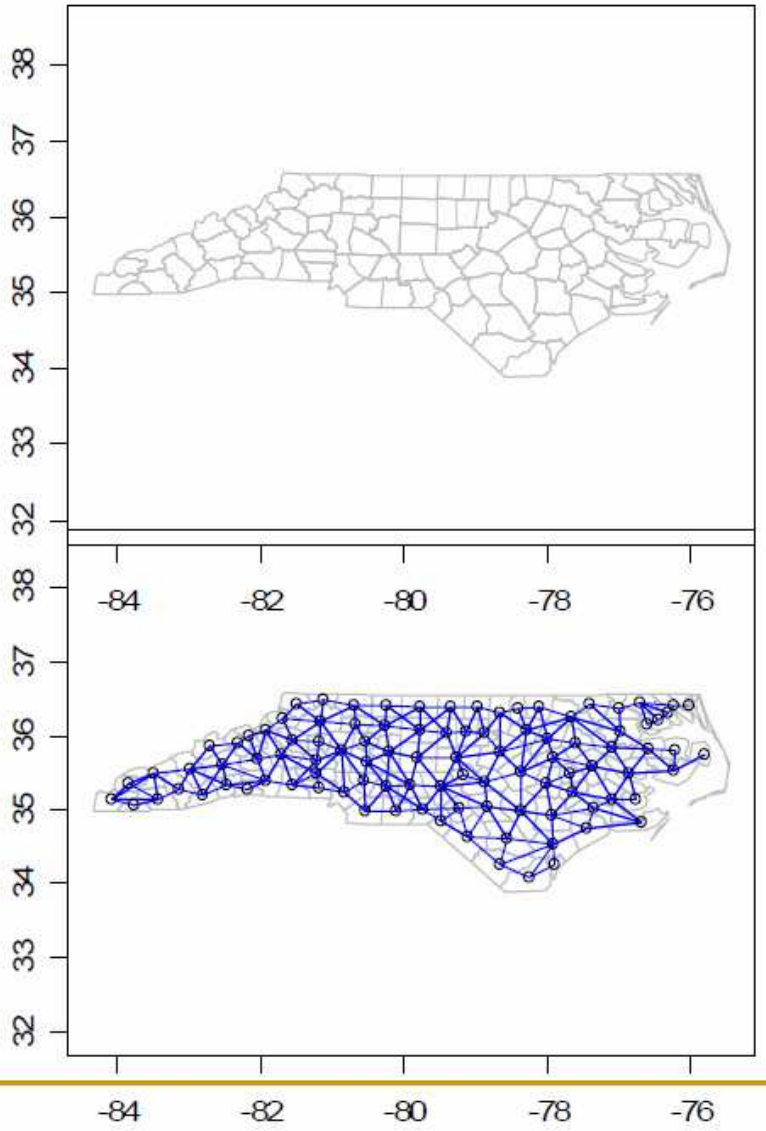
Cantons et graphe de voisinage

Covariables (en s) :

- Taux X(ds) au voisinage s,
- Nombre total de naissances,
- Pourcentage par communauté, etc

Questions :

- Auto corrélation spatiale ?
- Modélisation régression spatiale, SAR, régression AR, SARX (avec eXogènes)….



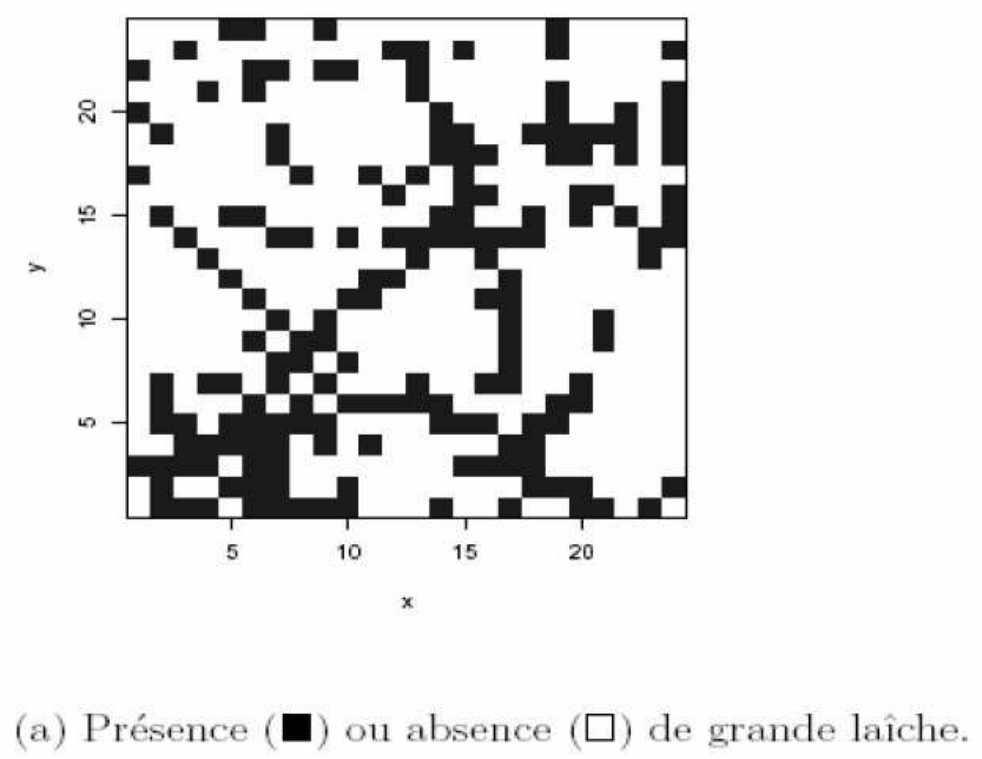
Modèle de Gibbs - Markov

Ex : répartition spatiale d'une espèce végétale

présence / absence de la *grande laîche*

Modèle de Auto - Logistique *{0,1}*

Voisinage de dépendance? Estimation, validation, tests ? Simulation



(a) Présence (■) ou absence (□) de grande laîche.

Données Ponctuelles

x = configuration spatiale de ***n*** points

3 exemples

(a) – 97 fourmilières : données `ants` de `spatstat`

(b) – 42 centres de cellules d'une coupe histologique (`cells`)

(c) -- 126 pins d'une forêt finlandaise (`finpines`)

Package **`spatstat`**

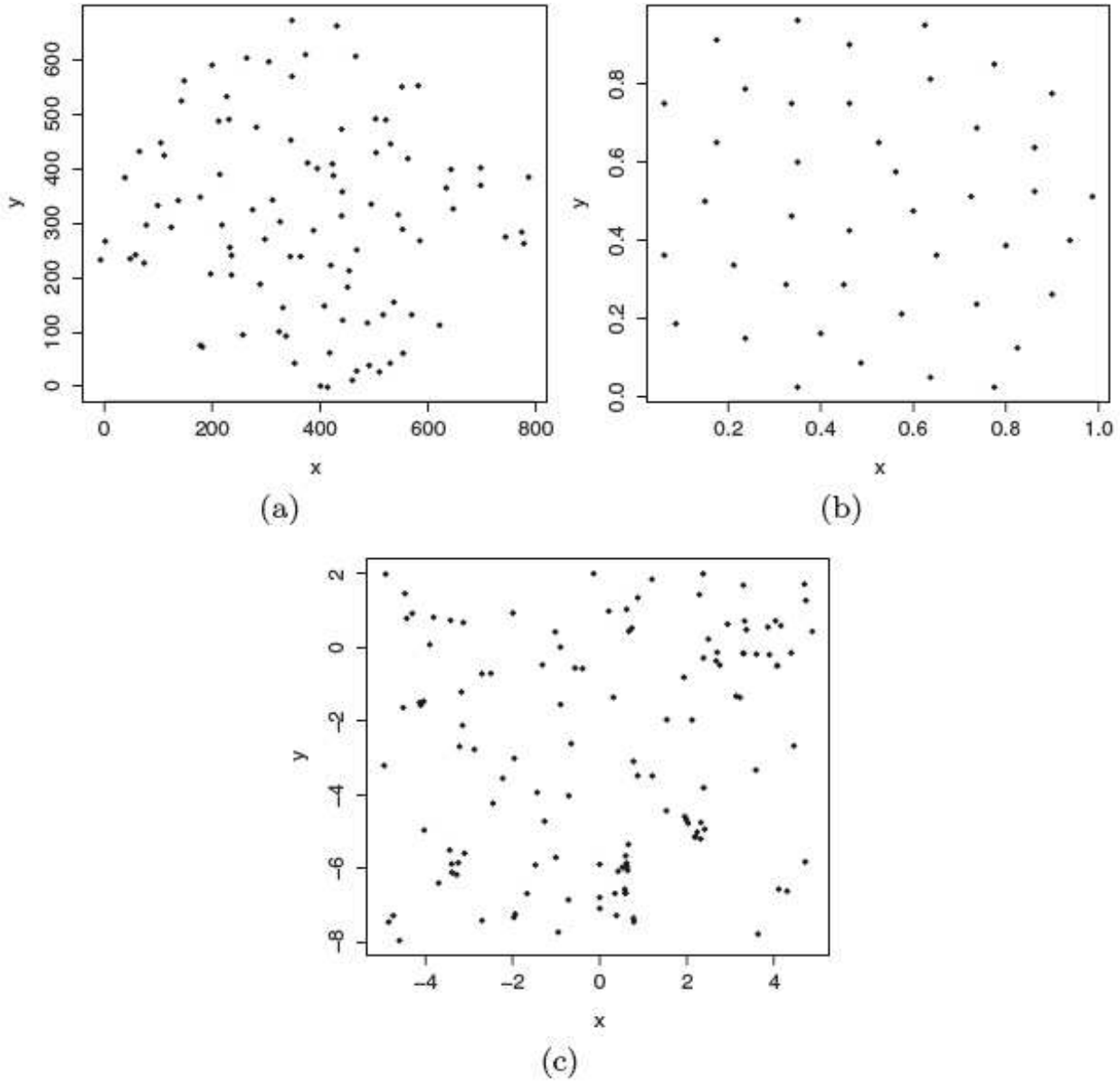


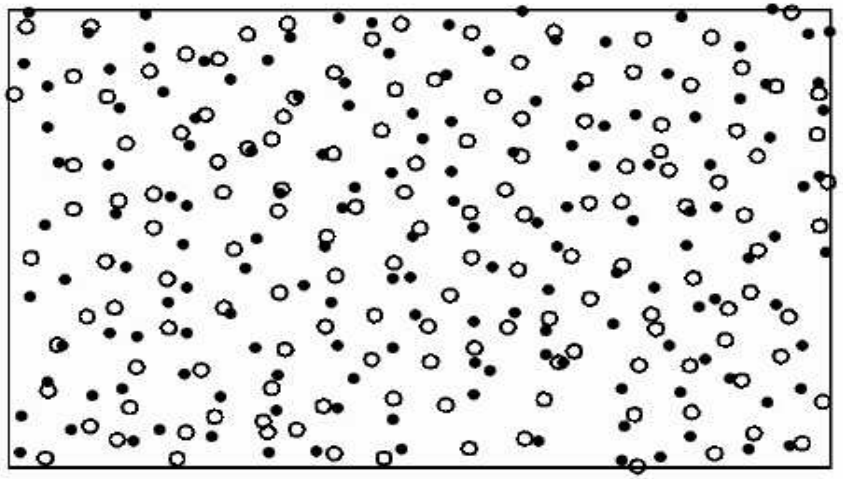
Fig. 3.1. Exemples de répartition ponctuelle : (a) 97 fourmilières (données `ants` du *package* `spatstat`) ; (b) 42 centres de cellules d'une section histologique observée au microscope (données `cells` de `spatstat`) ; (c) 126 pins d'une forêt finlandaise (données `finpines` de `spatstat`).

PP bivarié : 2 types de cellules de la rétine du lapin (294 en tout)

`> data(betacells)` et `> plot(betacells)`

« on » (°) active à l'ouverture de la lumière, « off » (.) à la fermeture.

Question : ces cellules sont-elles sur une même couche ?



Questions sur les Processus ponctuels

- Répartition spatiale ***au hasard*** (P.P.de Poisson = CSR pour Complete Spatial Randomness))
- Ou non :

  - avec compétition (chaque centre de cellule développe une zone d'influence)

  - avec coopération (i.e. agrégats autour d'un père)

- ***Homogénéité*** spatiale ou non
- Quels ***modèles explicatifs*** ?
- Statistique

Géostatistique

Modèles, prédiction, estimation

Terminologie proposée par Matheron (1962, École des mines de Fontainebleau)
Initialement pour ***l'évaluation des réserves minières***.
Aujourd'hui utilisée dans des domaines variés : environnement, épidémiologie, science de la terre, ….
Wackernagel (1995), Chiles et Delfiner (1999), Diggle et Ribeiro (2006).

Objectifs de la géostatistique

Modélisation

- Modèle au second ordre, covariance, stationnarité
- Modèle intrinsèque :accroi-sements stationnaires
- Régularité : continuité, dérivabilité
- Prédiction à covariance connue : le Krigeage (simple, universel)

Statistique

- Nuée variographique
- Variogramme empirique
- Estimation d'un modèle paramétrique
- Validation de modèle : validation croisée, bootstrap paramétrique

Champ du second ordre *X* sur *S* (*L**2)

- Domaine d'étude : sites *s* de *S*, sous ensemble de *R**2
- Observation *X(s) réelle* et de variance finie *: Var(X(s))<∞*
- *X* caractérisé par ses lois finies dimensionnelles

  Moyenne : *m(s) = E(X(s))*

  Covariance : *c(s,t) = cov (X(s), X(t))*
- Le plus souvent, modèle gaussien (pas une nécessité)

Différents Bruits Blancs (BB)

- **BB fort** : variables $\{e(s)\}$ i.i.d.
- **BB faible** : variables centrées et de même variances
- **BB gaussien** : BB faible gaussien
- **BB coloré** : variables centrées même variances mais corrélées

Caractérisation d'une covariance : la semi définie positivité (sdp)

$$\forall a \in \mathbb{R}^m \text{ et } \forall (s_1, s_2, \ldots, s_m) \in S^m : \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} a_i a_j c(s_i, s_j) \geq 0$$

$$Var\left(\sum_{i=1}^{m} a_i X_{s_i}\right) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} a_i a_j c(s_i, s_j) \geq 0.$$

Champ gaussien X

Si toute combinaison linéaire est gaussienne

X spécifié par sa moyenne m(.) et sa covariance c(.,.)

$$a = (a_s,\ s \in \Lambda),\ \sum_{s\in\Lambda} a_s X_s \ \textit{est une variable gaussienne.}$$

$$f_\Lambda(x_\Lambda) = (2\pi)^{-\sharp\Lambda/2}(\det \Sigma_\Lambda)^{-1/2} \exp\left\{-1/2\, {}^t(x_\Lambda - m_\Lambda)\Sigma_\Lambda^{-1}(x_\Lambda - m_\Lambda)\right\}$$

Champ stationnaire

- Moyenne *constante*
- Covariance *invariante par translation* :

$$c(s,t) = Cov(X_s, X_t) = C(t-s)$$

Champ isotrope

covariance invariante par isotropie :

$$c(s,t) = C_0(\|s-t\|) = C(s-t).$$

Propriétés d'une covariance stationnaire C

- C est *semi-définie positive*
- $I\ C(h)\ I \leq C(0)$
- $X(As)$ est stationnaire si $s \rightarrow As$ est linéaire
- Une somme pondérée à coefficients >0 de covariances est encore une covariance
- Si C est continue en 0, alors C est uniformément continue partout

Quelques covariances isotropiques

Portée *a >0* et Variance *σ**2 >0*

- ***Pépitique***: *C(0)= σ**2* et *C(h)=0* sinon
- ***Exponentielle*** : C(h) = *σ**2 exp(-a ll h ll)*
- ***Sphérique*** si *d≤3*

$$C(h) = \sigma^2 \left\{ 1.5\|h\|/a - 0.5(\|h\|/a)^3 \right\} \text{ si } \|h\| \leq a$$

C(h) = *0* sinon

- ***Gaussienne*** : $C(h) = \sigma^2 \exp(-(\|h\|/a)^2$

(cf. liste assez complète dans `> cov.spatial`)

Modèle(s) de Matern

- Plus un paramètre *v* contrôle la régularité de *C* en *0*
  (*K* est la fonction de Bessel de première espèce)
- *v* = ½ → cov. exponentielle
- *v* = ∞ → cov. Gaussienne
- Plus *v* augmente, plus *C(h)* est régulière en *0* et plus *X* est régulier (en moyenne quadratique)

$$C(h) = \sigma^2 2^{1-\nu} (\|h\| / a)^\nu \mathcal{K}_\nu (\|h\| / a) / \Gamma(\nu)$$

Champ intrinsèque et variogramme

- Considérer le champ des *h-accroissements* :

$$X_{s+h} - X_s : \ s \in S$$

- X *intrinsèque* si ses *h-accroissements* sont stationnaires

- Variogramme en h :

$$2\gamma(h) = Var(X_{s+h} - X_s)$$

Stationnaire ou intrinsèque ?

- Stationnaire → intrinsèque : $2\gamma(h) = 2(C(0) - C(h))$

- Intrinsèque ≠> stationnaire :
  Exemple : le mouvement brownien, *γ(h) = I h I*

- Un variogramme n'est pas toujours borné :

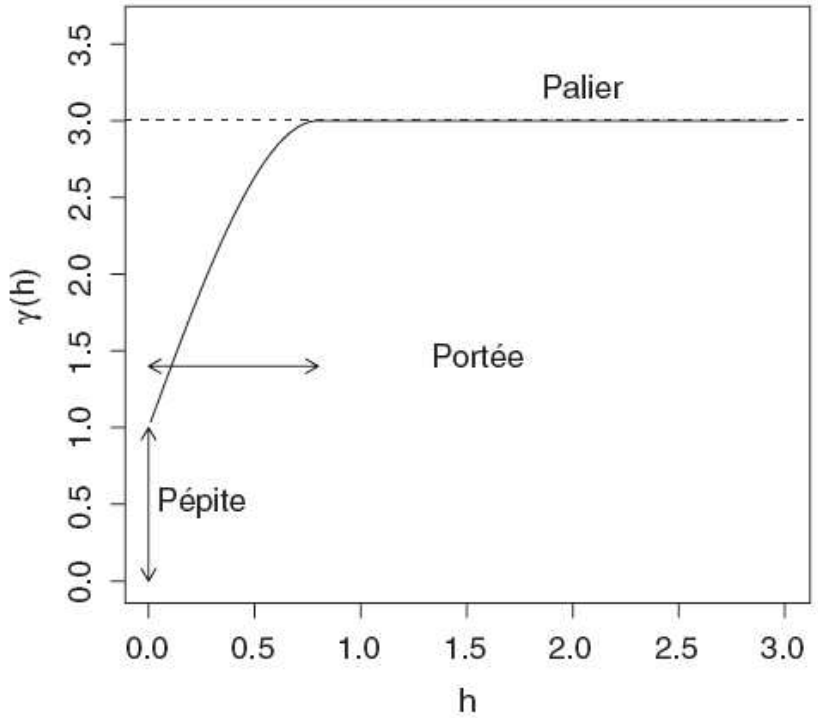
$$\gamma(h; b, c) = b\|h\|^c,\ 0 < c \leq 2.$$

  Exemple : vario puissance et auto-similarité (*c = 1* pour le mouvement brownien).

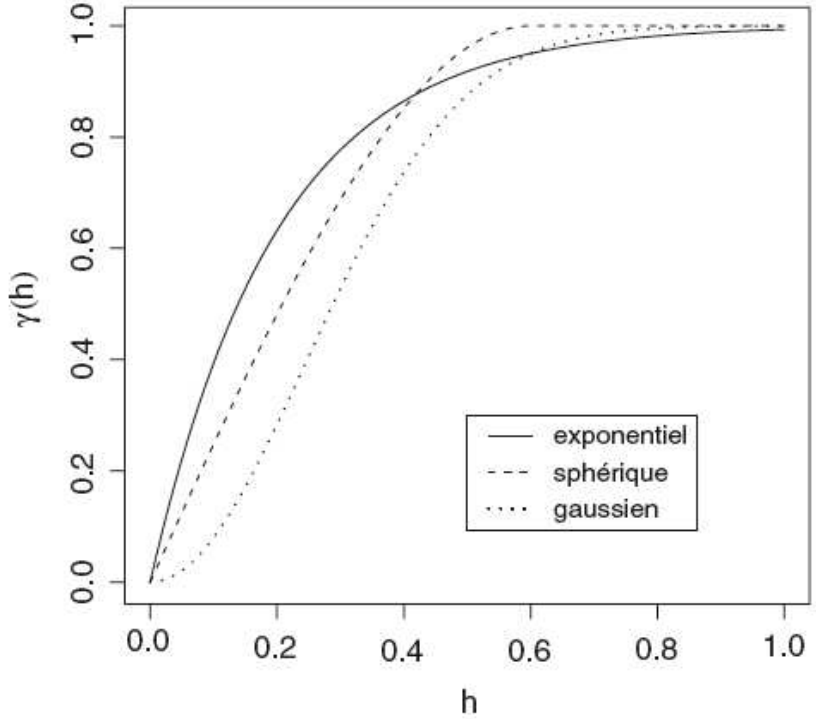
Portée, palier, effet pépite d'un variogramme

(a) Les 3 caractéristiques d'un variogramme

(b) Variog. expo.(1), sphérique (2) et gaussien (3) : *régularité* en 0 *linéaire* pour (1-2) et *parabolique* pour (3)



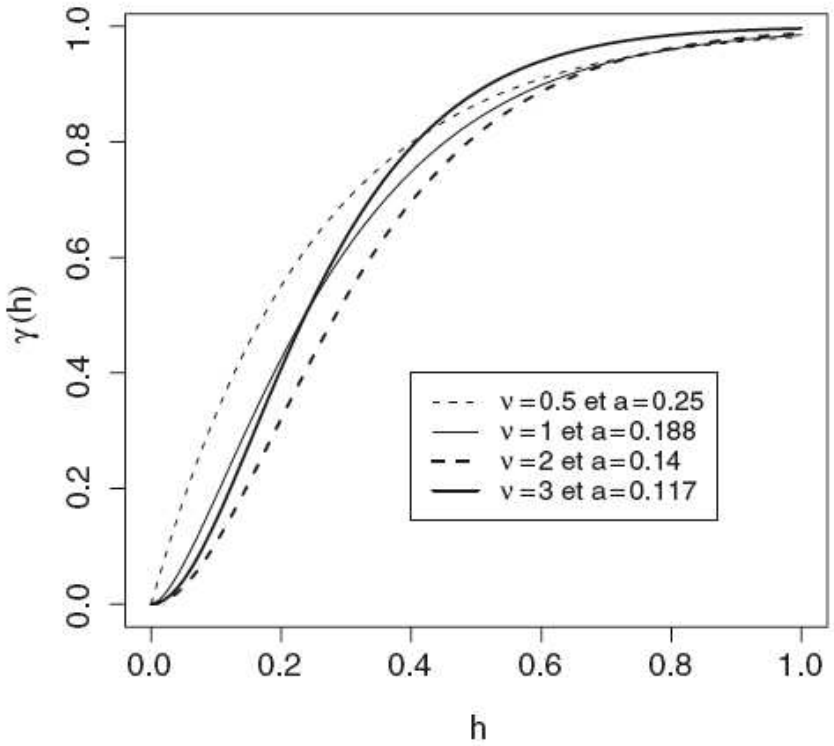
(a)



(b)

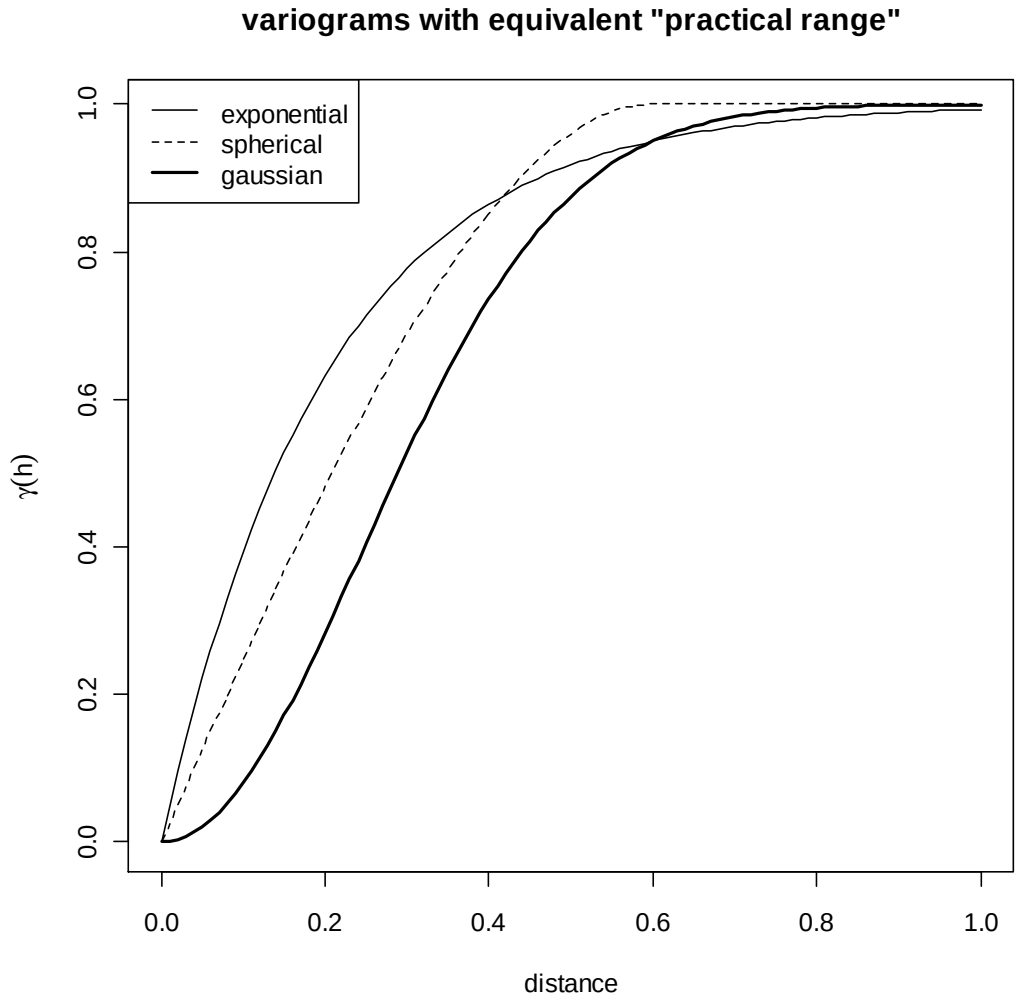
Régularité du variogramme de Matern

- *v = 1/2* donne le variogramme exponentiel
- *v* ↑, plus de régularité en *0*
- *v* ≥ *2, C* dérivable en *0* à dérivée nulle



`cov.spatial` de R → principales covariances spatiales

Exemple : expo., sphérique, gauss de même portée pratique.



Anisotropies

Variogrammes différents suivant les directions

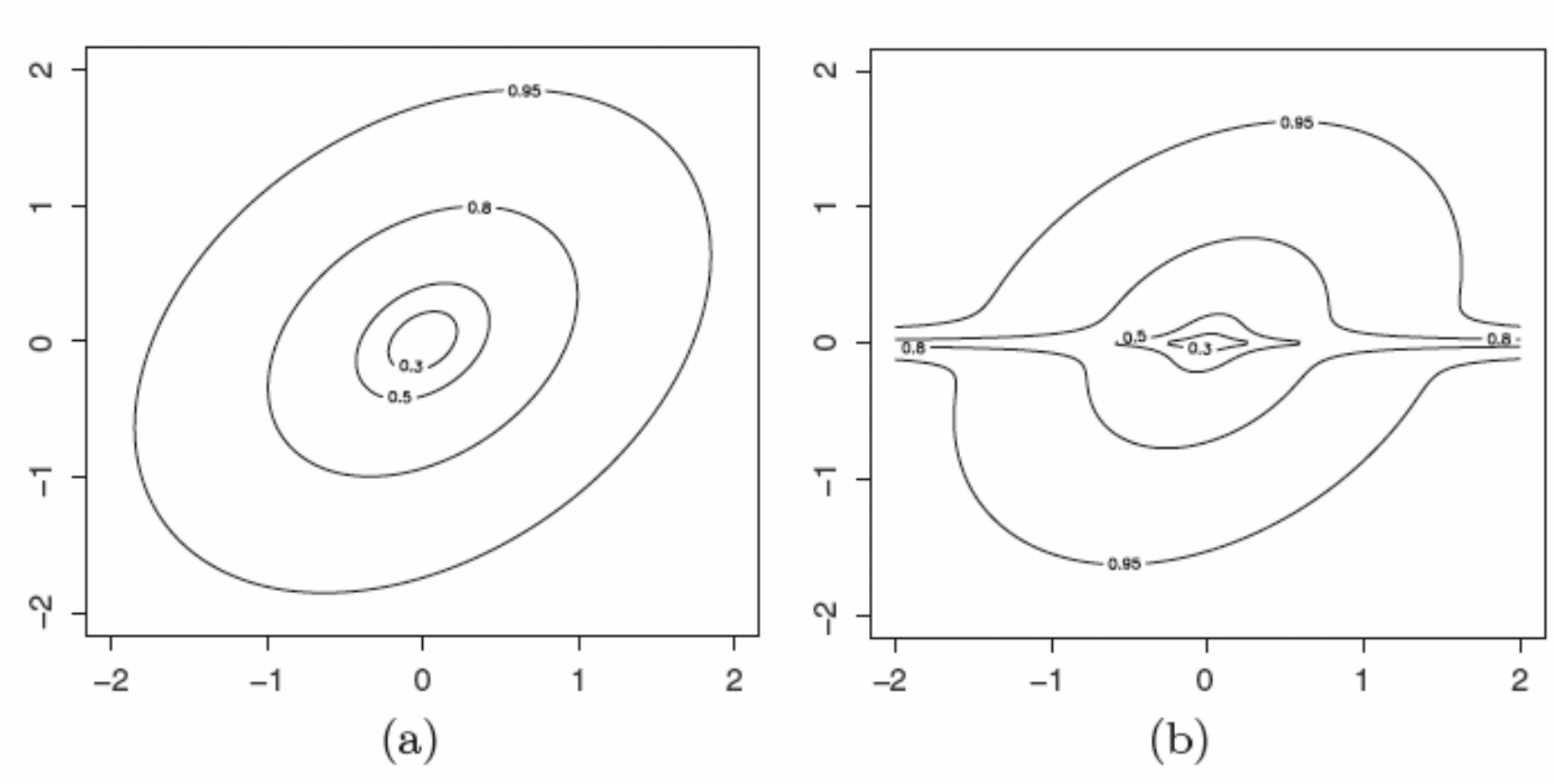
- Anisotropie géométrique : $\gamma(h) = \gamma_0(\|Ah\|)$

- Anisotropie zonale: $\gamma(h) = \gamma_1(\sqrt{h_1^2 + h_2^2}) + \gamma_2(|h_2|)$

Anisotropies

(a) : géométrique

(b) zonale



La régulatité de la covariance *C* en *0* *règle* la régularité en m.q. de *X* partout

- *C* continue en *0* → *X* continu partout
- *C''* exite en *0* → *X* dérivable partout

- Idem en remplaçant *C* par le variogramme *γ*
- Importance : régularité d'une carte de prédiction (Krigeage) est fonction du choix de *C (ou γ)*

Covariance « exponentielle de puissance » C(h)=exp-(h/**phi**)**k.
C(h) et simulations sur un intervalle pour **phi**=0.2 et k=1 (solide), 1.5 (tirets) et 2 (pointillés). **La régularité en** 0 **de** h→C(h) **augmente avec phi.**

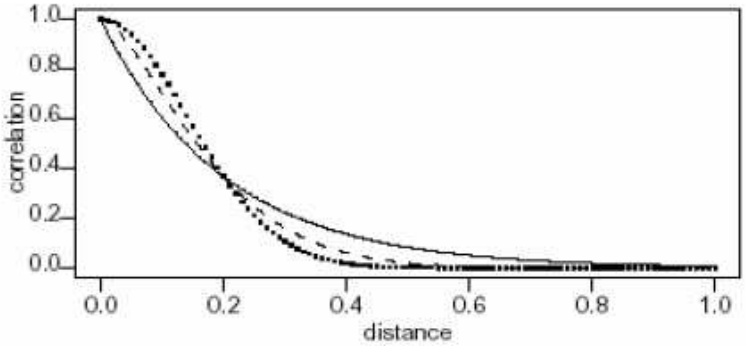
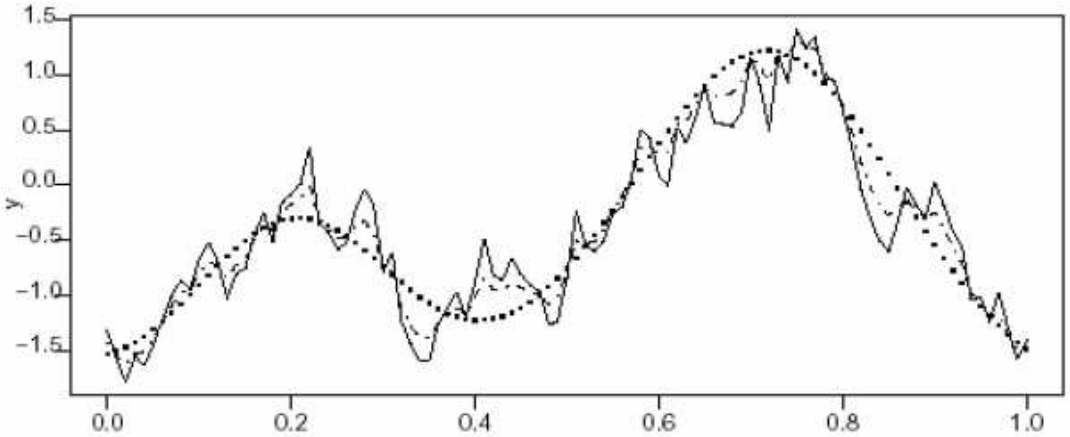


Figure 3.3. Three examples of the powered exponential correlation function with $\phi = 0.2$ and $\kappa = 1$ (solid line), $\kappa = 1.5$ (dashed line) and $\kappa = 2$ (dotted line).



Simulation d'un champ gaussien

le package `RandomFields`

`GaussRF` : simule un champ spatial ou spatio-temporel stationnaire

Il faut déclarer :

- la fonction de covariance
- la grille de simulation
- la tendance si il y en a une
- la méthode de simulation retenue

(cf. 1er exemple de champ stable pour différentes grilles)

`CovarianceFct` : donne liste des covariances/variogramme spatiaux ou spatio-temporel

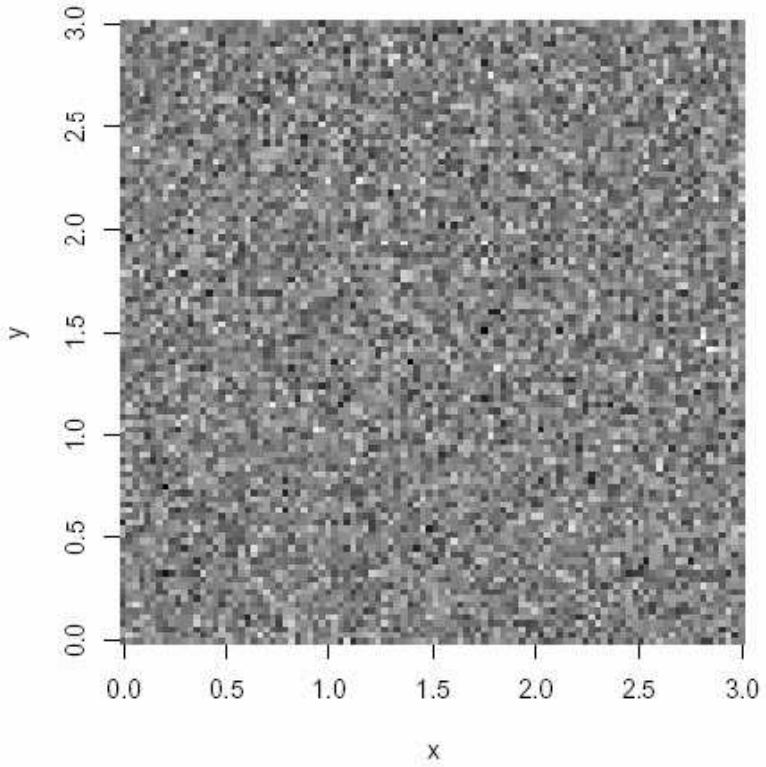
`CondSimu` : réalise la simulation conditionnelle d'un champ gaussien en dehors des sites d'observation

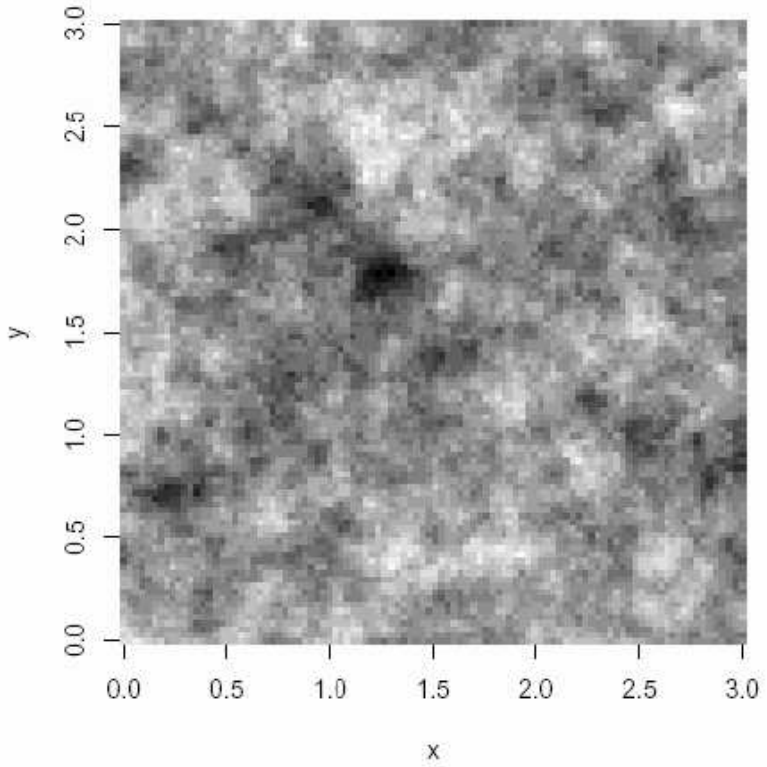
`ShowModels` : démonstration interactive de simulation de modèles

Réalisations d'un champ gaussien isotropique

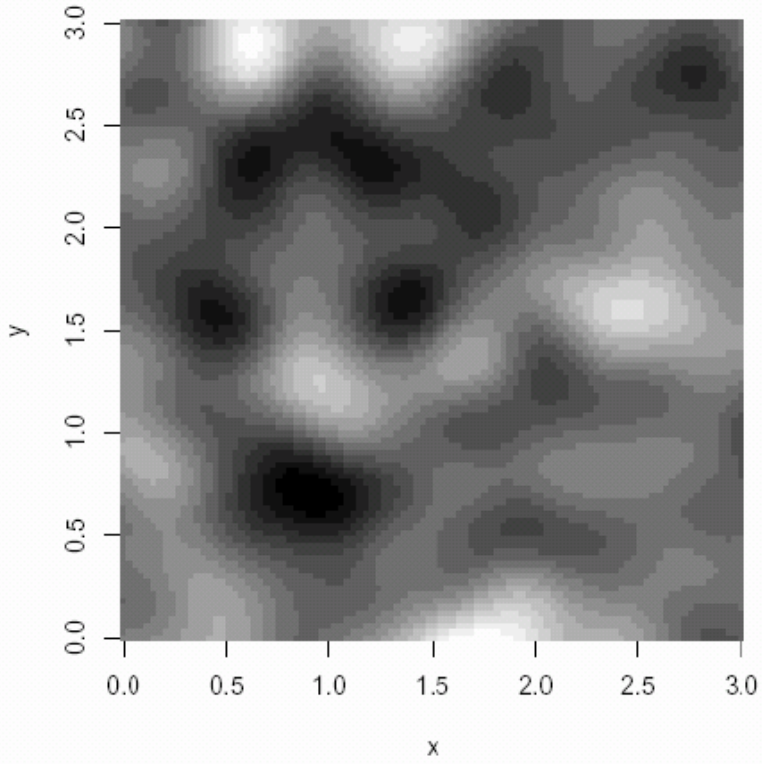
à gauche pépitique (discontinu);

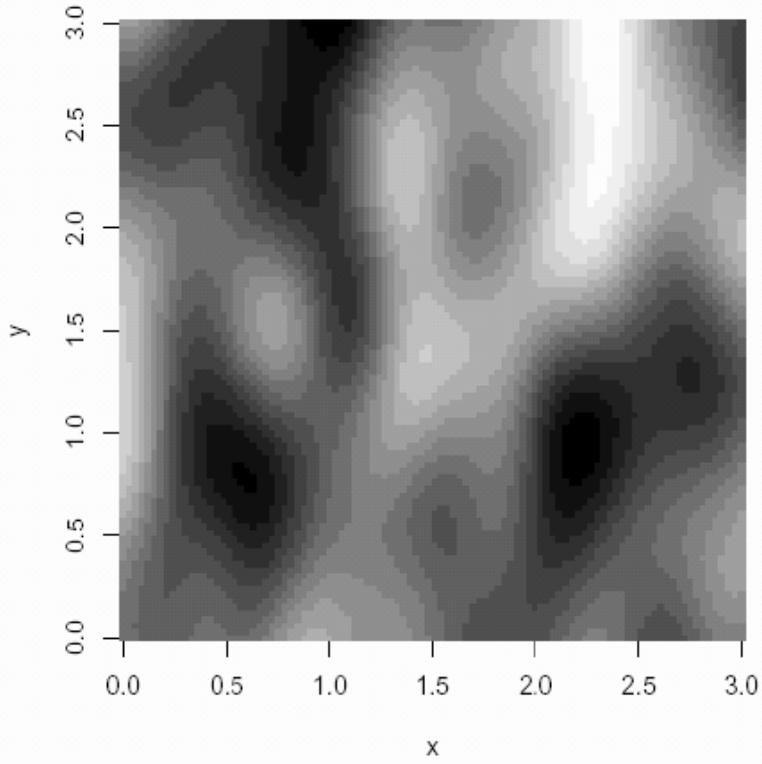
à droite exponentiel (continu mais non dérivable).





(suite) Champ gaussien isotropique **à variogramme gaussien**
à gauche, isotropique; **à droite**, anisotropique.
La surface s→X(s) est dérivable.





Prédiction à moyenne et covariance connue : le Krigeage simple

- Vecteur des *n* observations *X = (X(s(1)), X(s(2)), …, X(s(n)))*
- Prédire *X(s(0))* (*carte de krigeage)* partout sur *S*
- Choix d'une covariance connue (variogramme) *C :*

  Σ = cov(X) et *c = cov(X(s(0)),X)*
- Reconstruction par MCO : minimiser

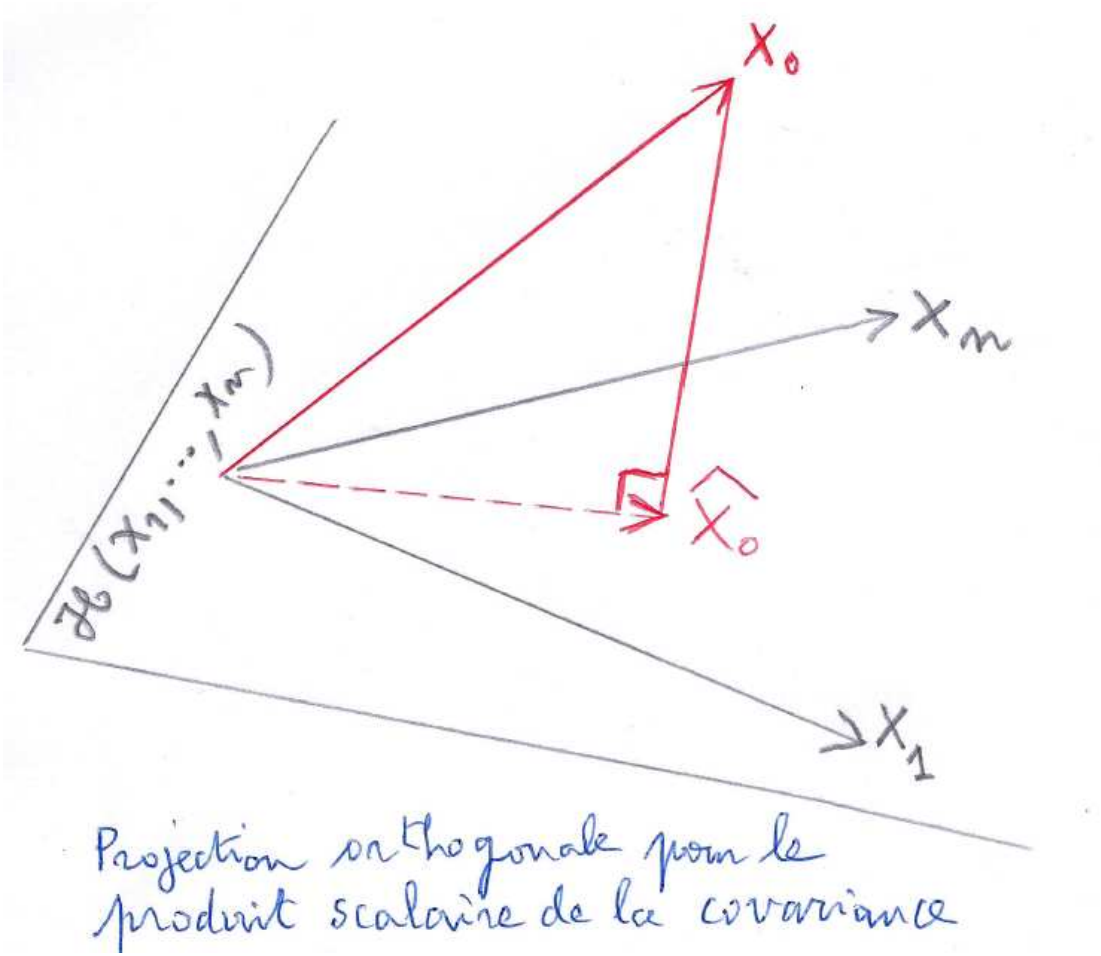
$$EQM(s_0) = E\{(X_0 - \widehat{X}_0)^2\}.$$

- si *X* de moyenne *m* connue, ***krigeage simple*** en *s(0)*

  Prévision BLUP et *Variance de prédiction* :

$$\widehat{X}_0 = {}^t c\Sigma^{-1}X, \qquad \tau^2(s_0) = \sigma_0^2 - {}^t c\Sigma^{-1}c.$$

Krigeage = Prédiction = Projection orthogonale
pour le produit scalaire de la covariance



Le Krigeage universel : *m* inconnue

- *X* suit un *modèle de régression* : covariables *Z*, paramètre *δ* inconnu, *ε* résidu de covariance *Σ*

$$X = Z\delta + \varepsilon$$

- *Le krigeage* :

1. Estimer *δ* par *MCG*
2. Krigeage simple sur résidu *ε*

$$\widehat{X}_0 = {}^t z_0 \widehat{\delta} + c\Sigma^{-1}(X - Z\widehat{\delta}), \qquad \text{avec}$$
$$\widehat{\delta} = ({}^t Z \Sigma^{-1} Z)^{-1\,t} Z \Sigma^{-1} X.$$

Krigeage / prédiction avec geoR

- `krige.conv`

  Effectue la prédiction partout (en fait sur une grille à définir) pour un modèle de variogramme donné (ou un modèle estimé par `variofit` ou par `likfit`)

  Option pour le krigeage simple, ordinaire opu universel.

- `Output.control`

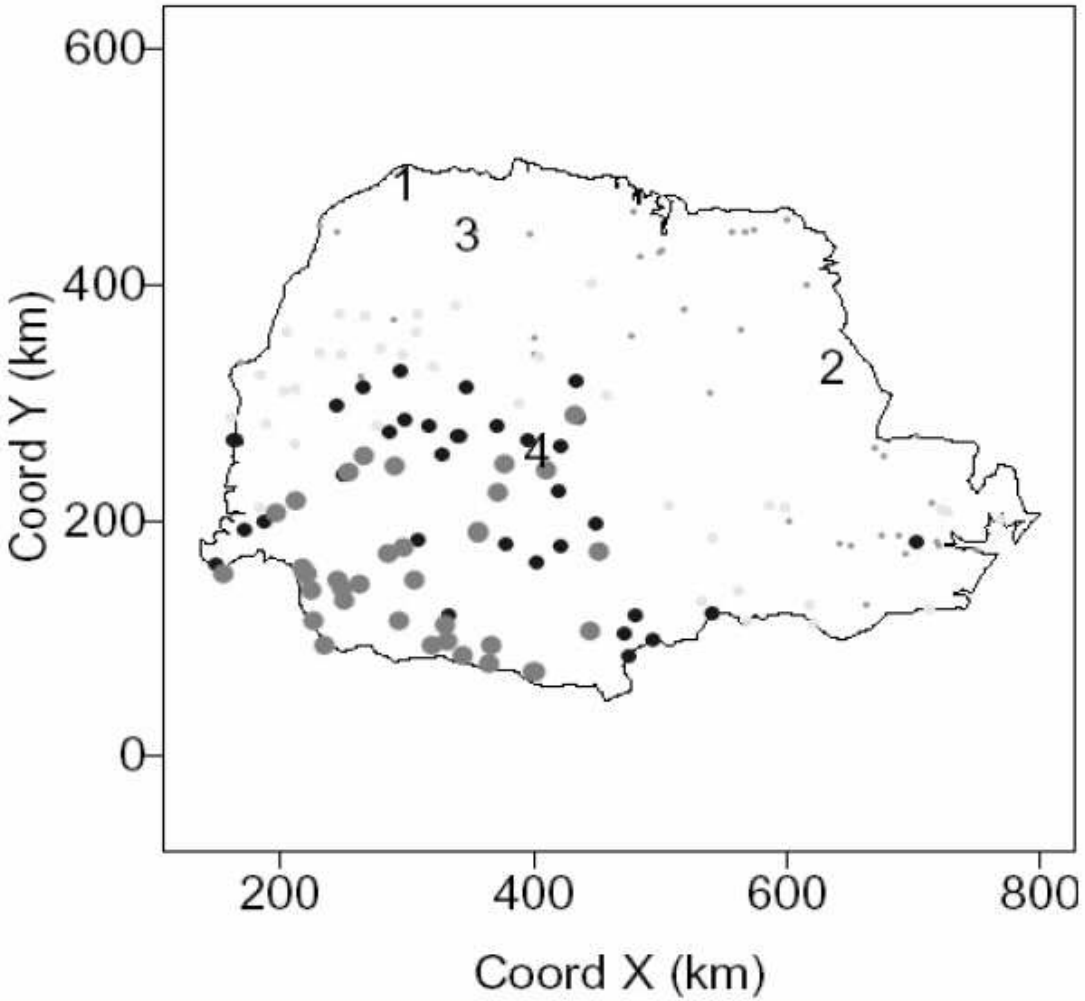
  Réalise des simulations conditionnelles; permet d'évaluer la carte des probabilités de dépasser un seuil.

- Voir également les packages

  `Fields` (`Krig` et `sim.Krig.grid`) et

  `RandomFields` (`Kriging` et `CondSim`)

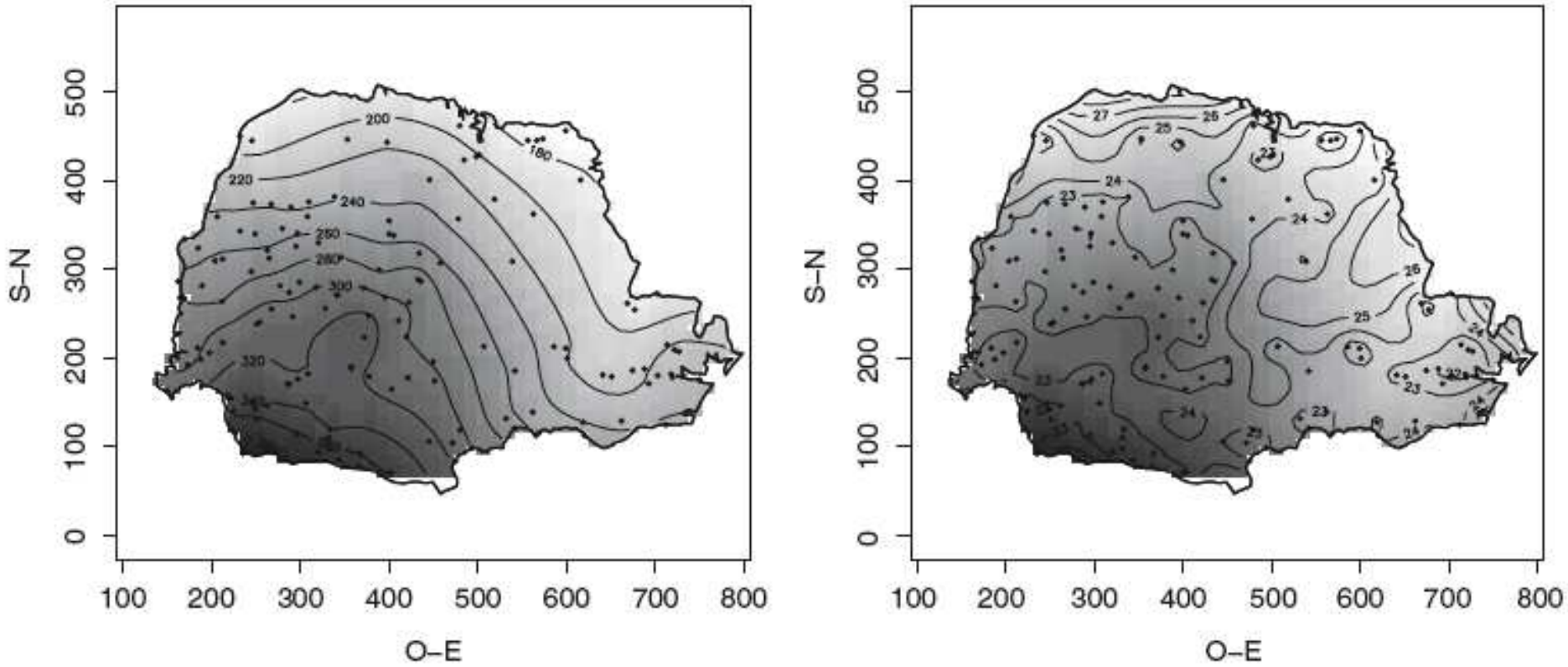
Données de pluies Parana : codage en (taille/gris) associé aux quartiles empiriques de la distribution observée.



Krigeage des pluies Parana

Modèle : régression affine et résidu Gauss + Pépite

- à gauche carte des *hauteurs* de pluie (données en ●)
- à droite carte des *écarts types* des prédictions



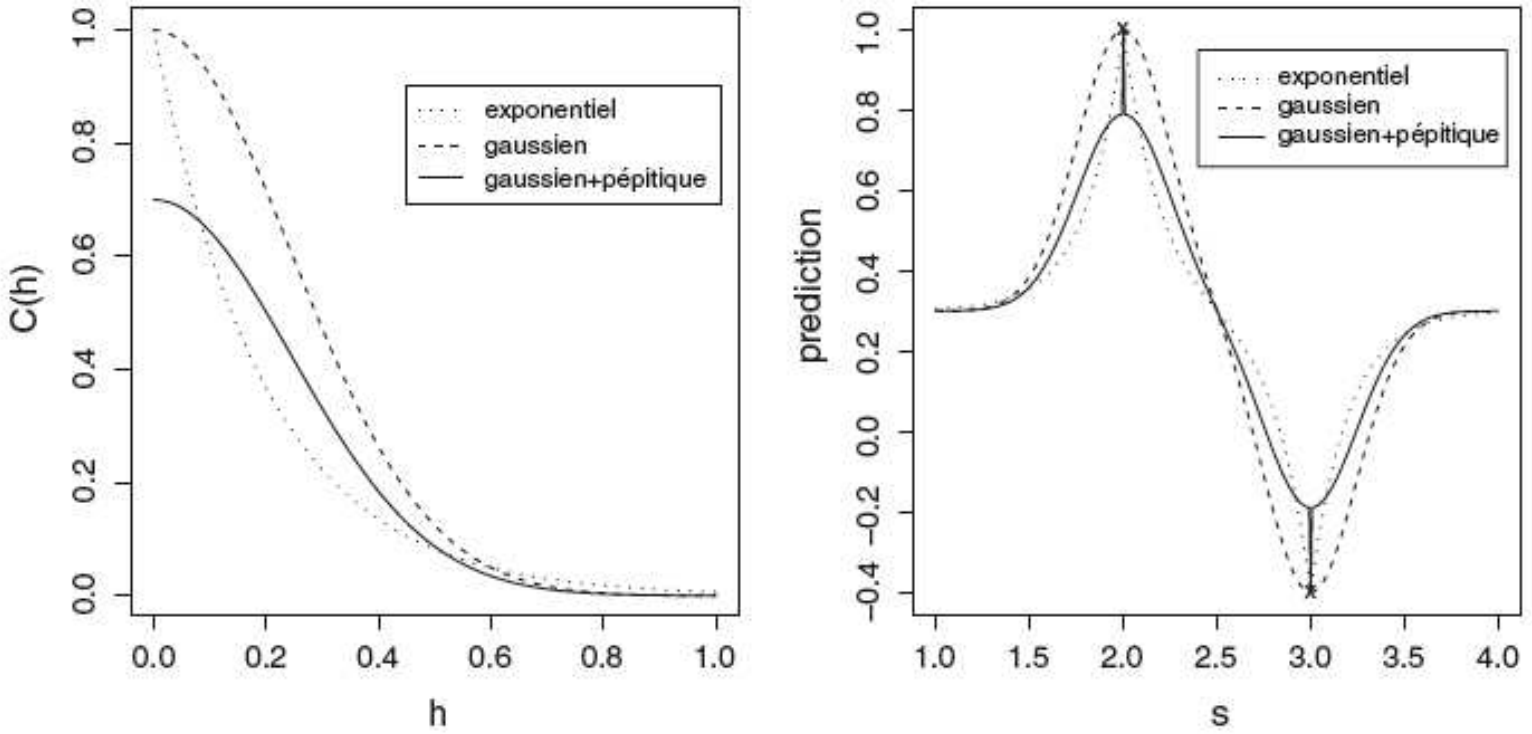
Propriété de la surface de Krigeage

1. ***Interpolateur universel*** : krigeage ≡ observation en un point d'observation
2. ***Régularité de la surface de krigeage*** fonction de la ***régularité du variogramme*** (covariance) en 0 :

- ***Pépitique*** *:* krigeage constant partout ≡ la moyenne arithmétique des observations, discontinuité aux points d'observation.
- ***Linéaire pointu en 0*** : surface continue mais non dérivable aux points d'observations.
- ***Parabolique en 0 :*** continue et dérivable partout.

Régularité du Krigeage et régularité à l'origine de la covariance spatiale

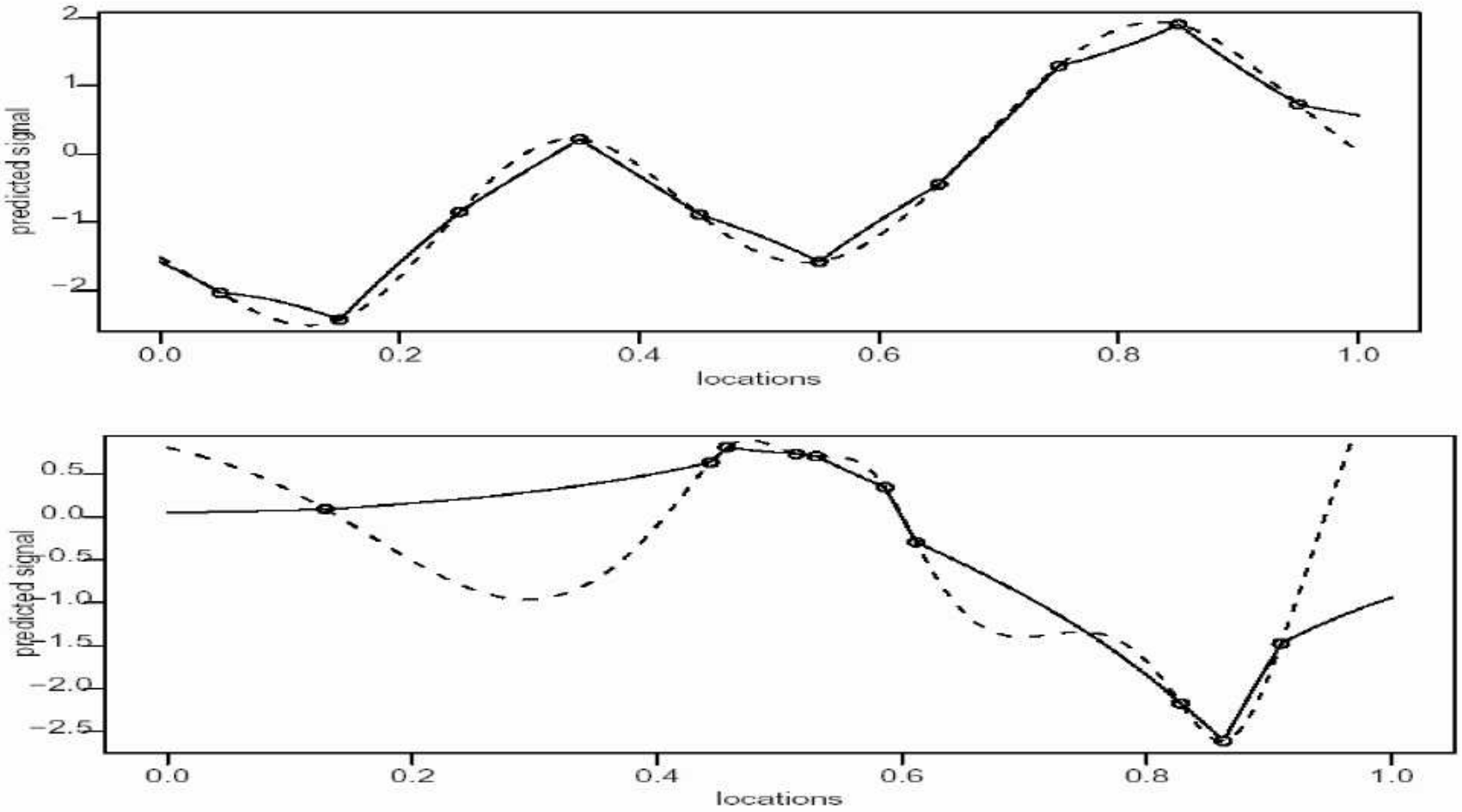
Exemple d'école : 2 observations en (x) et 3 reconstructions



Prédictions sur un intervalle à partir de 10 points

Deux variogrammes : exponentiel (continu) et Matérn (pointillé);

Deux dispositifs : en haut, points régulièrement espacés; bas, placés au hasard



Krigeage ou simulation conditionnelle

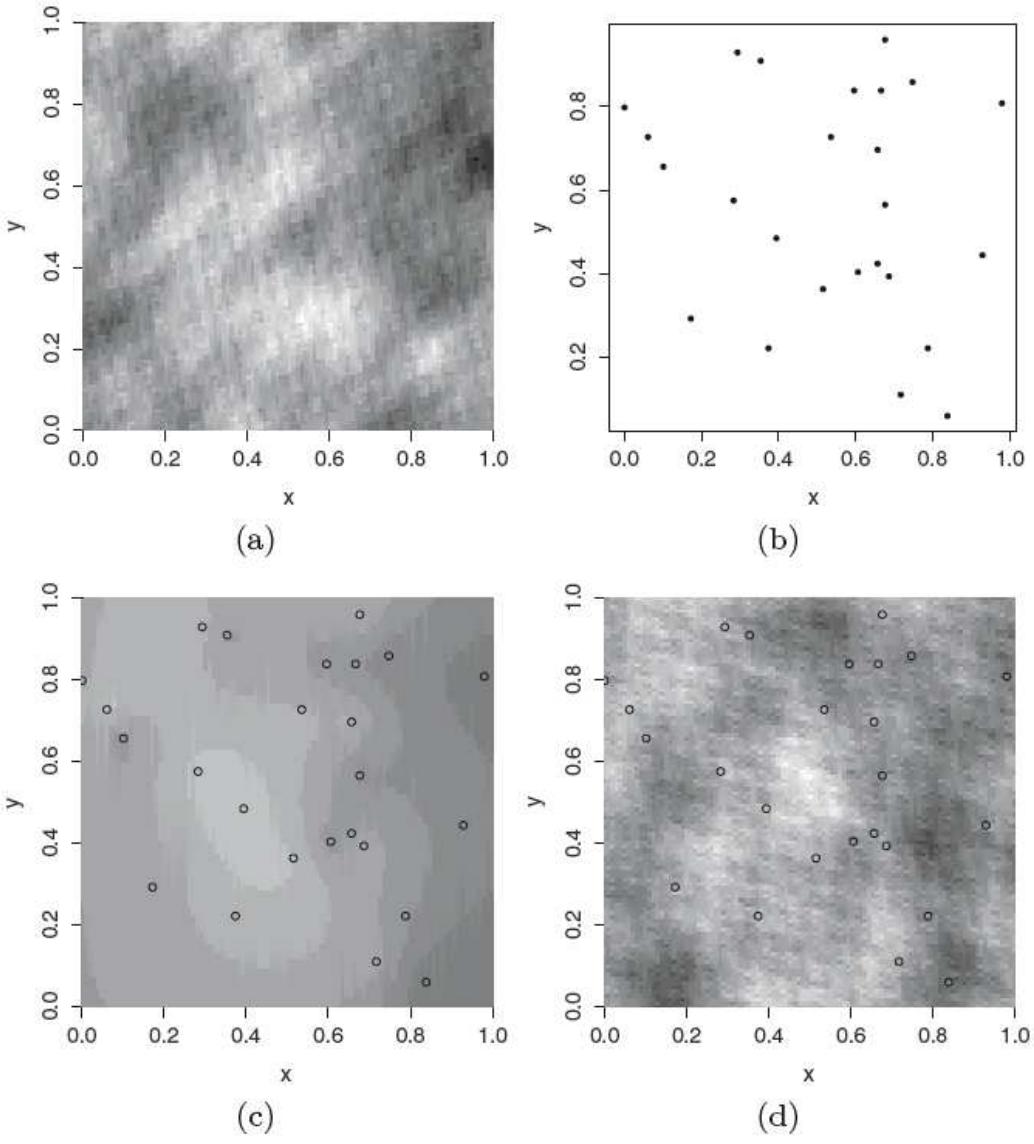
(a) *X* simulé, gaussien, cov. exponentielle

et

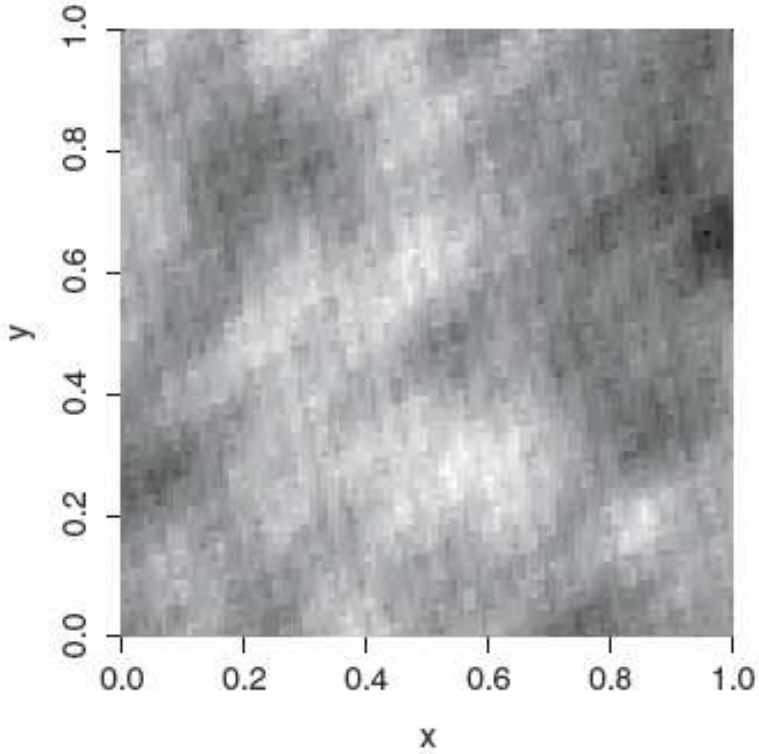
(b) 25 points échantillonnés

(c) reconstruction de X par krigeage

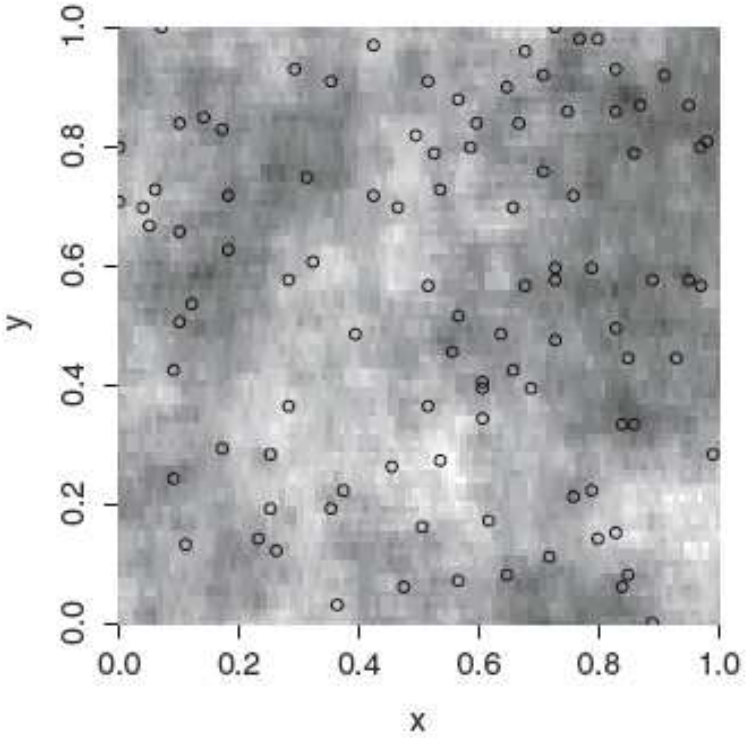
(d) reconstruction de X par simulation conditionnelle aux 25 observations



Simulation conditionnelle à 100 points



X initial



simulation cond.

Statistique des modèles de géostat

- Deux niveaux : au **premier ordre** (moyenne, tendance) et au **deuxième ordre** (covariance, variogramme).
- Statistique sans modèle : estimations empiriques.
- Statistique avec modèle : MCO, MCP, MCG ou MV.
- Validation et choix de modèle : validation croisée, Bootstrap paramétrique ou méthode de Monte Carlo.

Nuée variographique (cas isotropique)

Observation de X en n points $\mathcal{O} = \{s_1, s_2, \cdots, s_n\}$

Nuée variographique = nuage des $\frac{n(n-1)}{2}$ points :

$$\mathcal{N} = \{(\|s_i - s_j\|, (X_{s_i} - X_{s_j})^2, i \neq j\}$$

Comme $E((X_{s_i} - X_{s_j})^2) = \gamma(s_i - s_j)$,

$\Longrightarrow$ $\mathcal{N}$ "estime" sans biais $h \mapsto \gamma(h)$

- Plus lissage avec bon noyau de convolution
- si *X* non isotropique, nuées dans les 4 directions cardinales *{E,NE,N,NW}* avec une tolérance angulaire de *± 22.5 °*

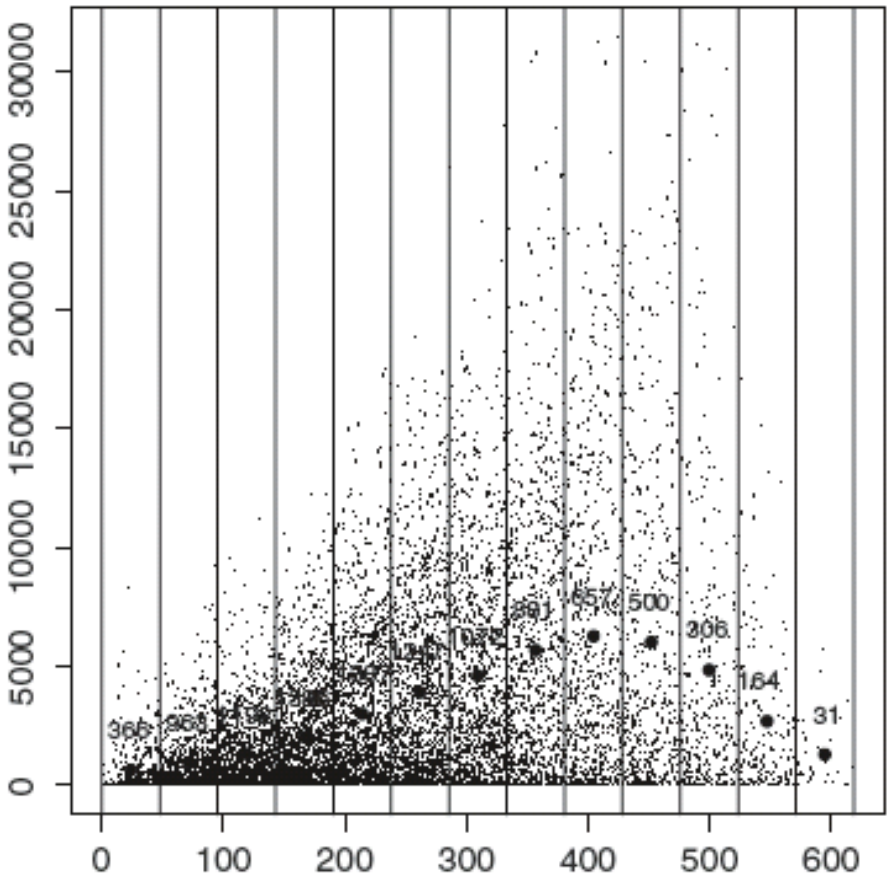
Estimation empirique du variogramme

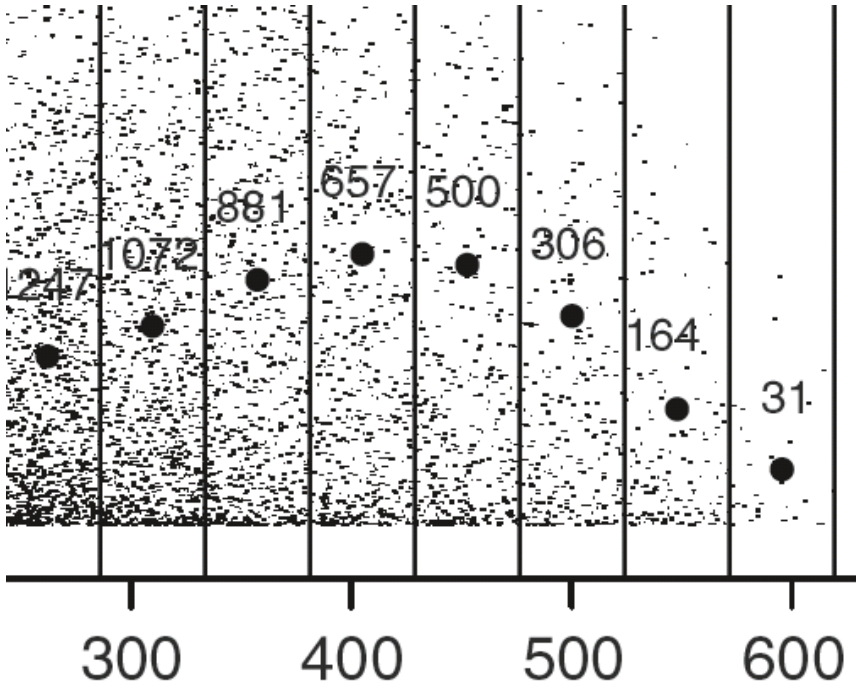
1 - *N(h)* : ensembles des couples *r*-voisins à *Δ*-près
(au moins 30 points dans chaque *N(h)*)
2 - *Avantage* : ne nécessite pas d'estimation préalable de la moyenne (nécessaire pour estimer une covariance)
3 - *Version robuste* aux grandes valeurs *(X(s(i))-X(s(j)))**2*
(*Cressie et Hawkins*)

$$\widehat{\gamma}_n(h) = \frac{1}{\#N(h)} \sum_{(s_i,s_j)\in N(h)} (X_{s_i} - X_{s_j})^2, \qquad h \in \mathbb{R}^d.$$

$$N(h) = \{(s_i, s_j) : \ r - \Delta \leq \|s_i - s_j\| \leq r + \Delta \, ; \, i, j = 1, \ldots, n\}.$$

Estimation empirique du variogramme :
Choix de classes de distances et effectifs par classes



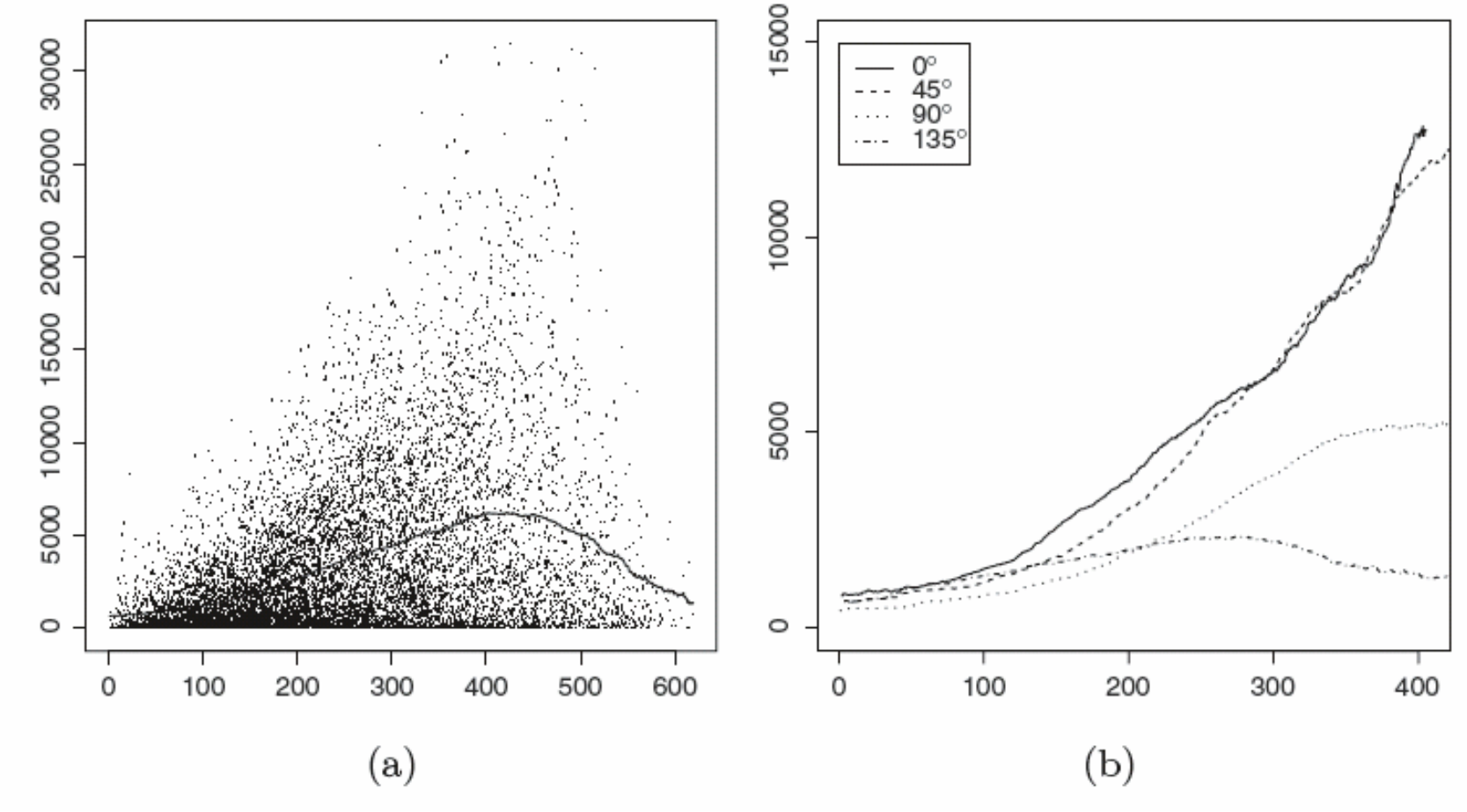


Nuée variographique et variogrammes lissés

(données de pluies au Parana)

(a) modèle isotropique

(b) dans 4 directions



`variog` : **calcul du variogramme empirique**

- isotrope ou non (`variog4`),
- Fixation ou non du nombre de classes (bin)
- estimation classique ou robuste

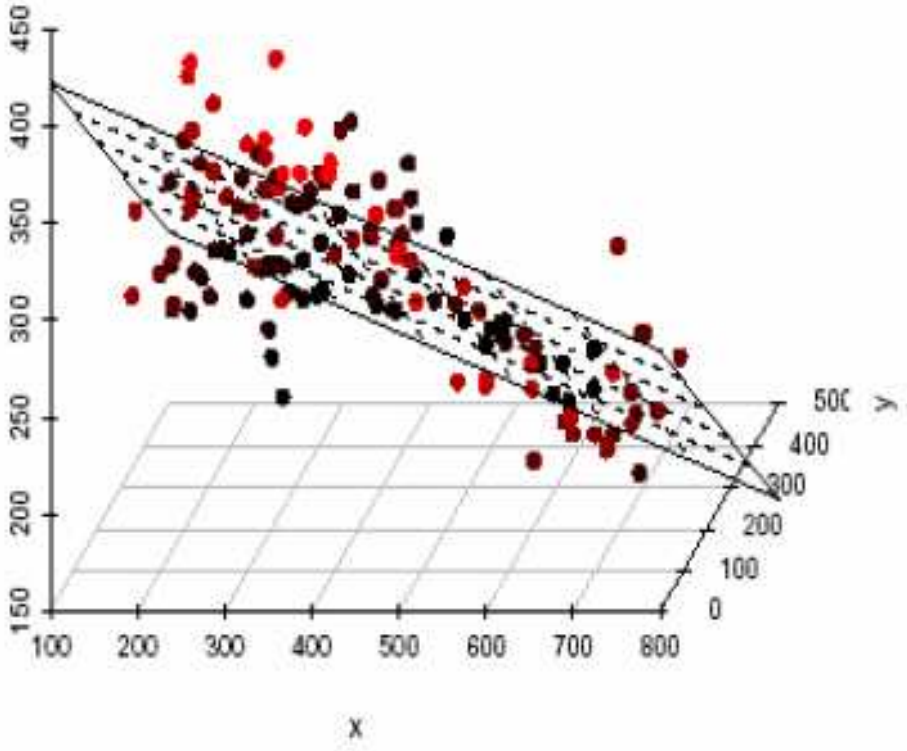
Retourne une estimation par classe (bin), le nuage variographique, le variogramme lissé …

```
> variog(ca20)
> print (x)
> plot(x)
```

Données Parana : ajustement affine

Rouges : au dessus **Noirs** : au dessous

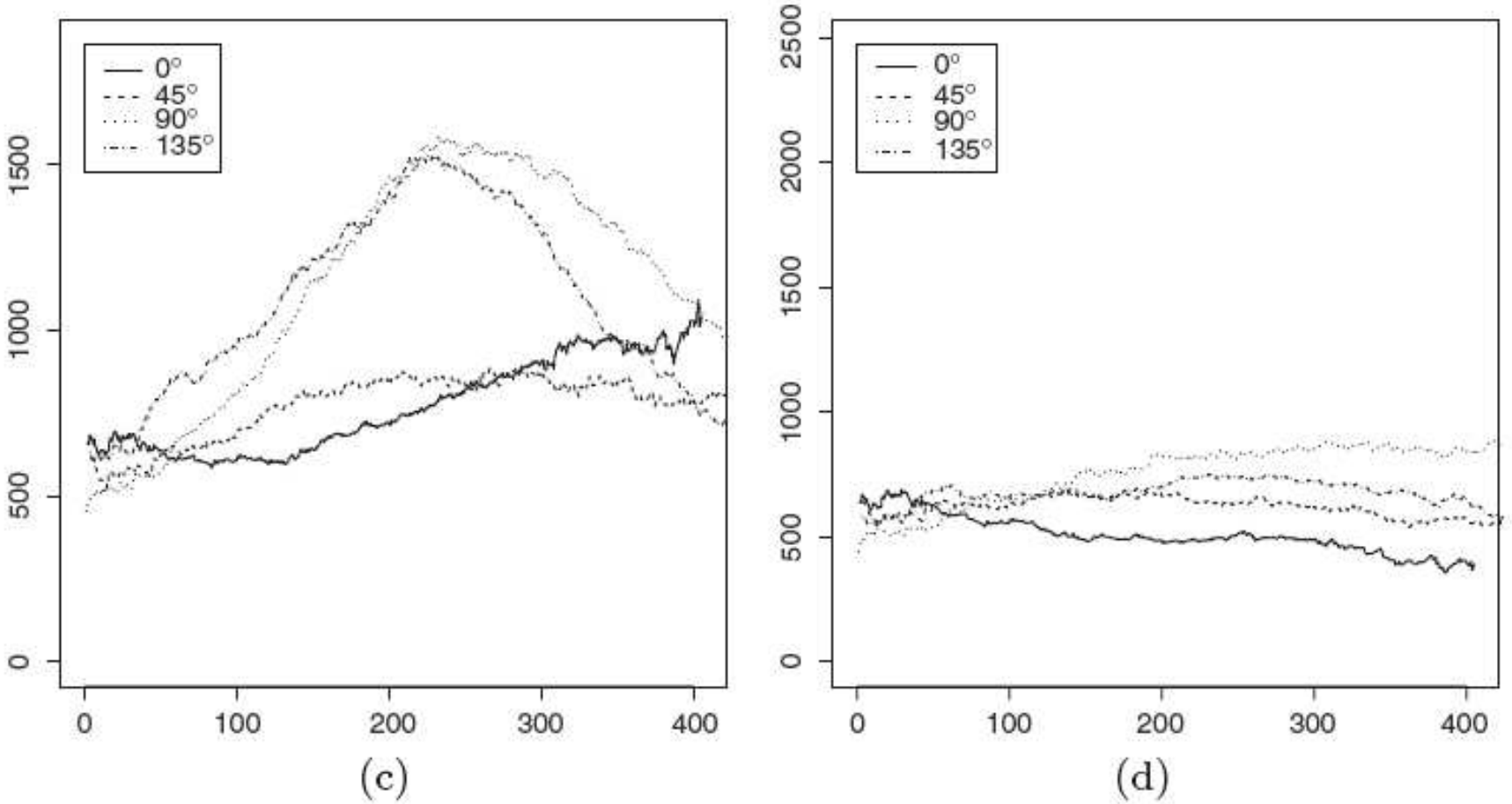
→ calcul des résidus puis variogramme des résidus



Variogrammes des résidus dans 4 directions pour:

(c) le modèle moyen affine (pluies au Parana);

(d) le modèle moyen quadratique ……



Estimation d'un modèle paramétrique :

Choisir k *classes* de distances *rendant identifiable le modèle* de variogramme :

$$\text{variogramme } \gamma(\cdot;\theta)$$

$$k \text{ classes } \mathcal{H} = \{h_1, h_2, \cdots, h_k\}$$

Estimations d’un modèle de variogramme

1 – Moindres carrés ordinaires (MCO)
2 – Moindres carrés pondérés (MCP)
3 – Moindres carrés généralisés (MCG) et MCQG
4 – Maximum de Vraisemblance (MV)

$$\widehat{\theta}_{MCO} = \underset{\alpha \in \Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{k} \left(\widehat{\gamma}_n(h_i) - \gamma(h_i;\alpha)\right)^2$$

$$\widehat{\theta}_{MCP} = \underset{\alpha \in \Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{k} \frac{\#N(h_i)}{\gamma^2(h_i;\alpha)} \left(\widehat{\gamma}_n(h_i) - \gamma(h_i;\alpha)\right)^2$$

$$\widehat{\theta}_{MCG} = \underset{\alpha \in \Theta}{\operatorname{argmin}}\, {}^t(\widehat{\gamma}_n - \gamma(\alpha))\{Cov_\alpha(\widehat{\gamma}_n)\}^{-1}(\widehat{\gamma}_n - \gamma(\alpha))$$

Estimation du variogramme en présence d'une tendance linéaire

$$X_s = {}^t z_s \delta + \varepsilon_s, \qquad \delta \in \mathbb{R}^p$$

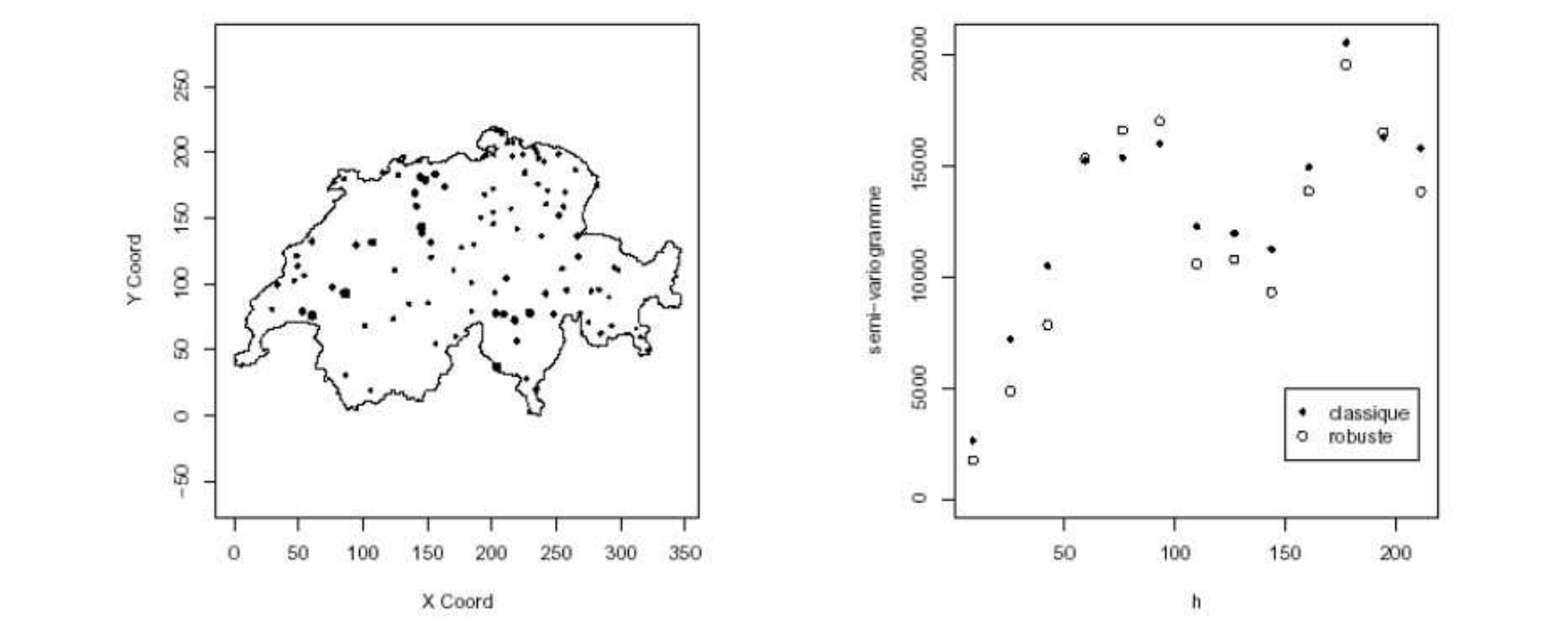
résidu champ intrinsèque centré,

$$E(\varepsilon_{s+h} - \varepsilon_s)^2 = 2\gamma(h, \theta), \qquad \theta \in \mathbb{R}^q.$$

1. Estimer par *MCO*
2. En déduire les résidus des *MCO*
3. Variogramme de ces résidus *MCO*

Estimations modèles de pluies en Suisse

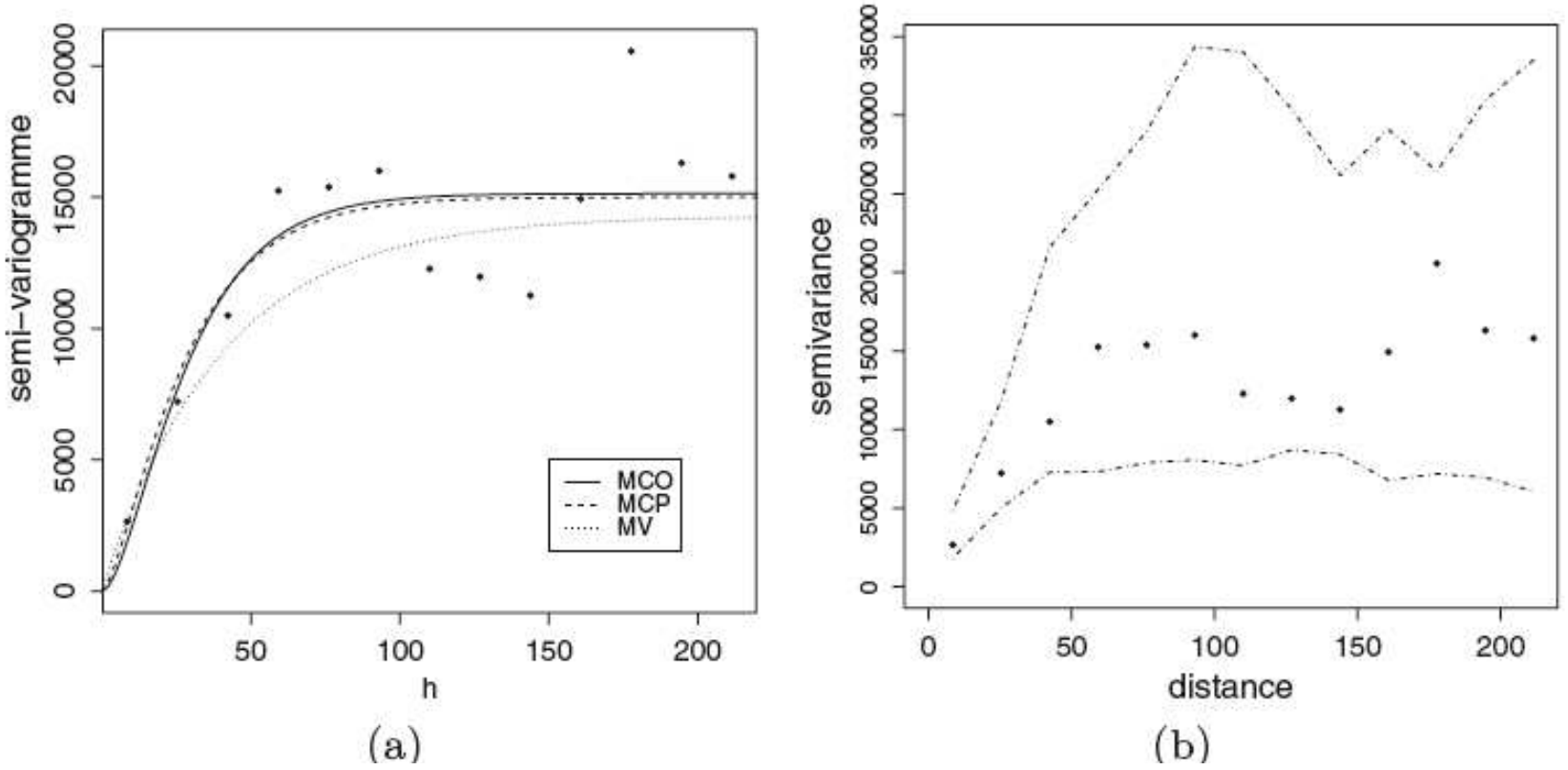
A gauche : données (stations et intensité);
A droite : estimations empiriques classique et robuste sur 13 classe de distances.



Estimation du modèle de Matern

(a) MCO, MCP et MV du variogramme de Matern

(b) Estimations empiriques + *enveloppes sup* et *inf* à partir de m=40 simulations du modèle de Matern estimé par MCP (intervalle de confiance à *1- 2/(m+1) = 95 %*)



`variofit` et `likfit` : **estimation d'un variogramme paramétrique**

- `variofit`

  estime les paramètres d'un modèle de covariance (variogramme) par MCO ou par MCP, ceci à partir du variogramme empirique (variog)

- `likfit`

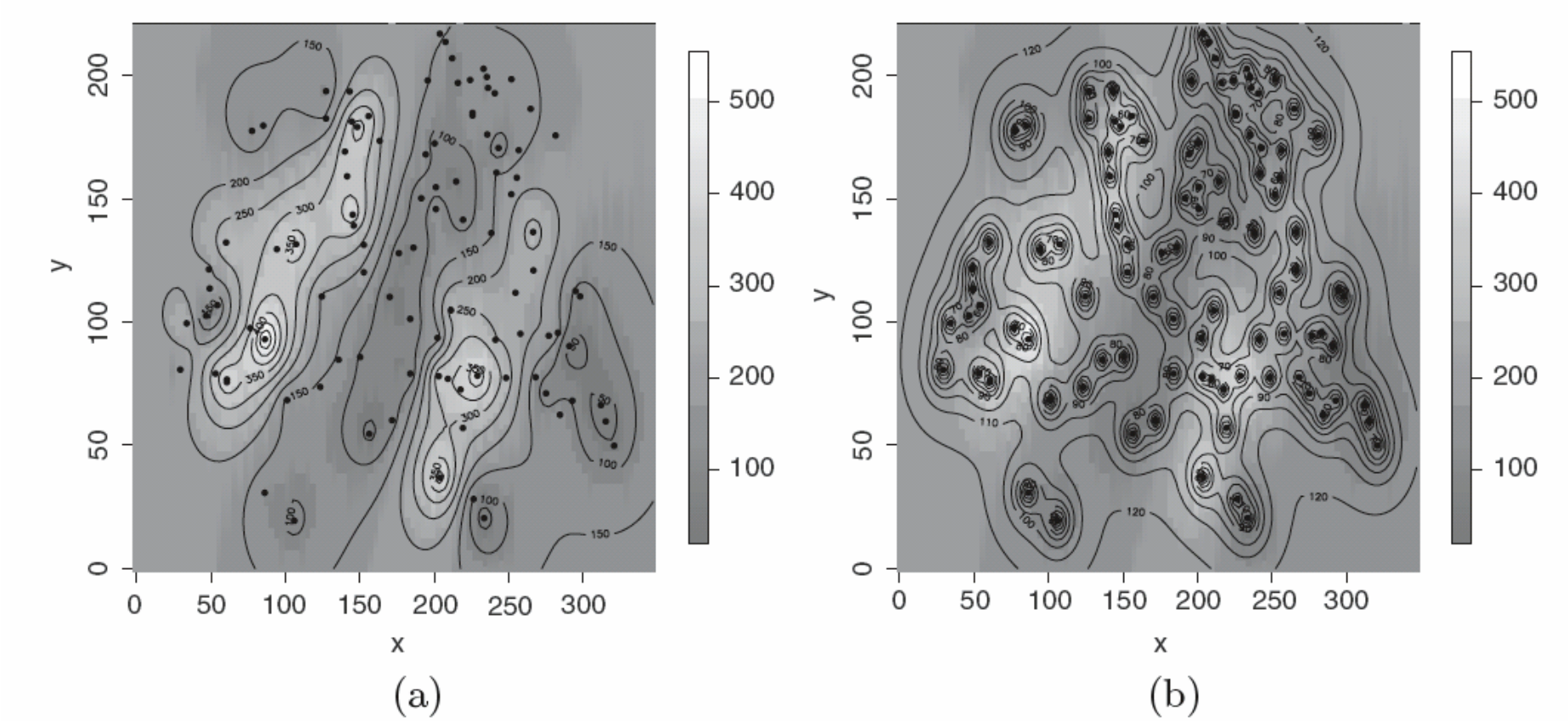
  réalise l'estimation par maximum de vraisemblance

- **Exercice :** *sur un jeu de données (personnelles), estimer un modèle paramétrique par MCO et par MV. Représentations simultanées des estimations empiriques et paramétriques.*

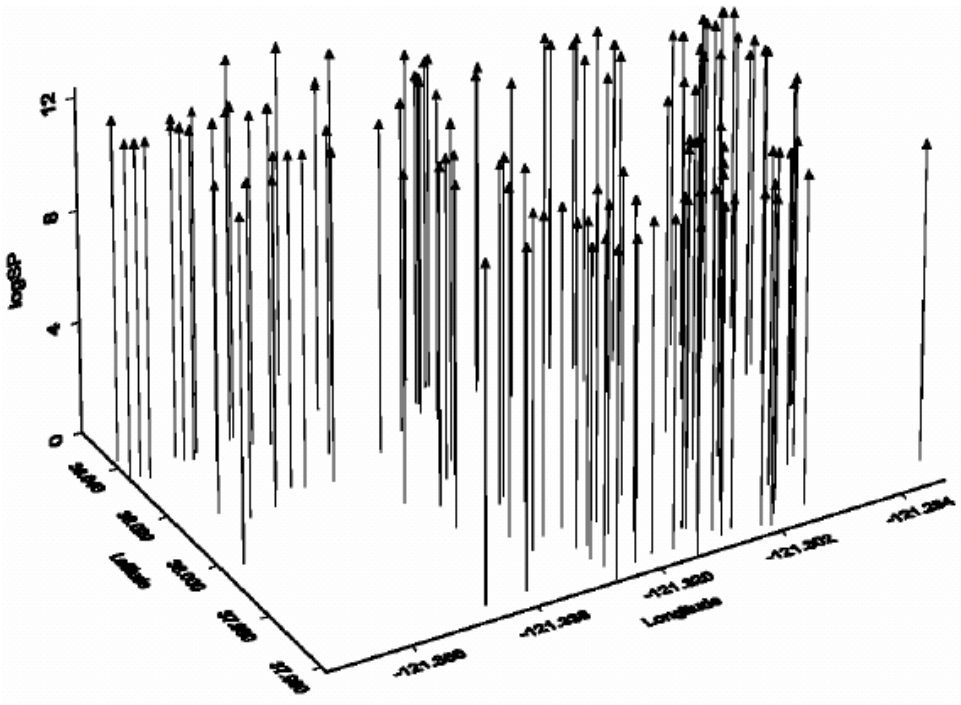
Krigeage pour le modèle de Matern

(données suisses)

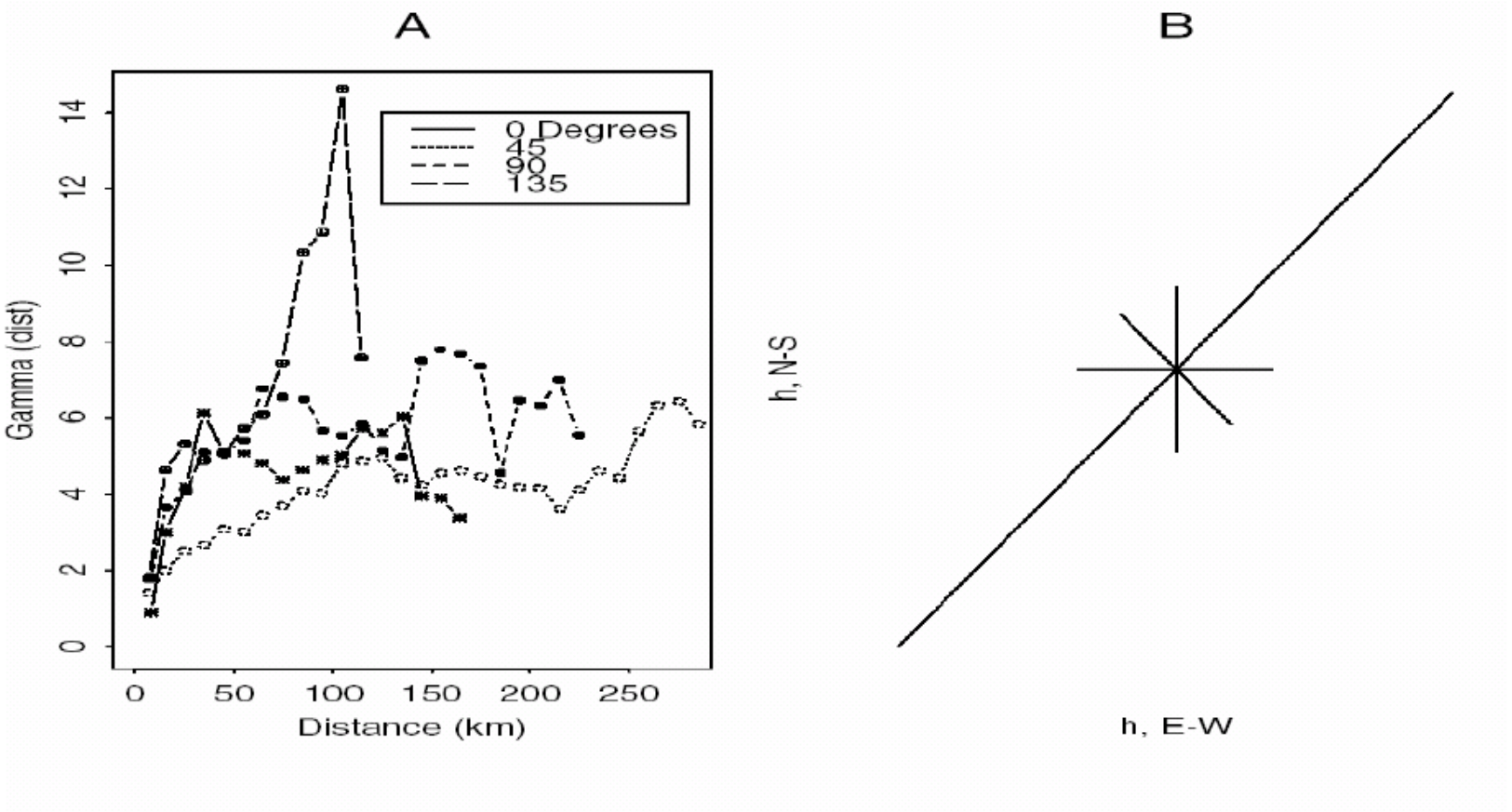
(a) carte des pluies et (b) de leurs écarts types



Exemple : densité de pêche de la coquille Saint Jacques dans l'atlantique nord



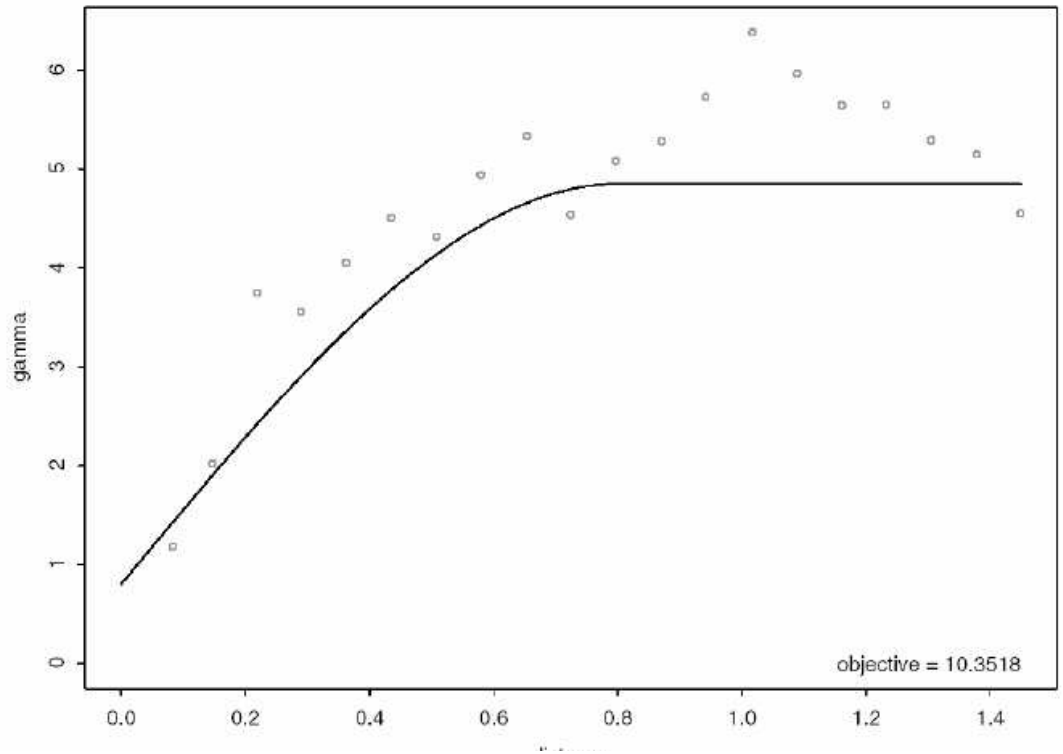
Données de « **Pêche de coquilles saint Jacques** »
Variogrammes directionnels et rose d'anisotropie.



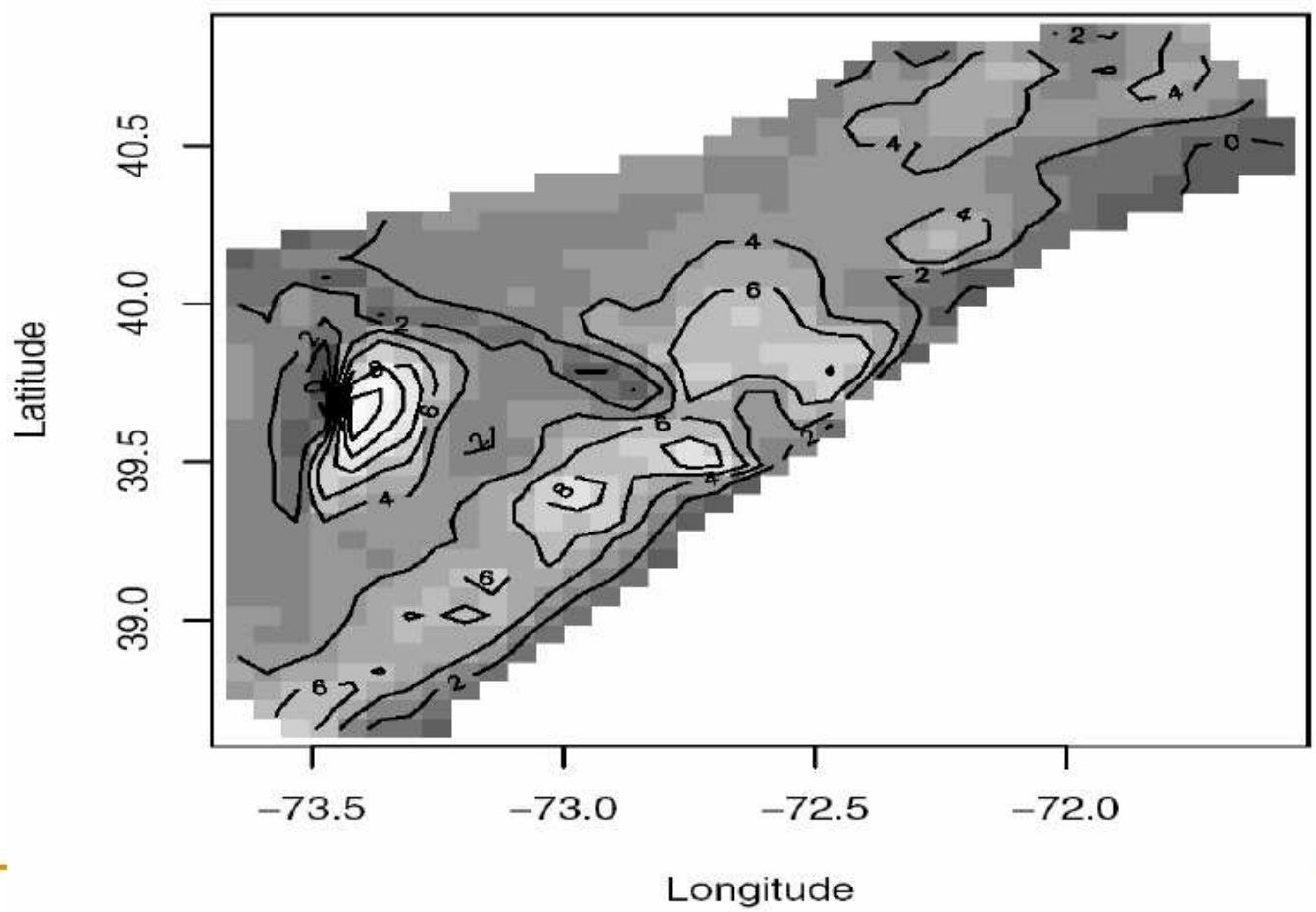
Estimation du modèle « sphérique + pépitique »

(après transformation isotropiante)

Estimation empiriques robustes sur 20 classes de distances;
Estimation du modèle « sphérique + pépitique » : **portée** = 0.8 ; **var**= 4.8 et bruit additif de variance 0.7.



Krigeage : carte de prédiction de la densité en coquille Saint Jacques pour le modèle sphérique estimé.



Convergence et normalité asymptotique des estimateurs

- Choix de *k* classes de distances identifiant le modèle paramétrique
- Régularité suffisante de la fonctionnelle d'estimation
- Faible dépendance (mélange) du champ géostatistique
- Extension des résultat au cas où il existe une tendance paramétrique (paramètres d'ordre 1, moyenne) et 2 (variogramme des résidus).

→ Voir les résultats (Lahiri, Cressie, C. Gaetan – X. G.)

Validation d’un modèle paramétrique

- Validation croisée
- Validation par Bootstrap paramétrique

Validation croisée d'un variogramme

- Estimer le modèle paramétrique
- Éliminer à tour de rôle une observation *x(i)* et la prédire par *krigeage* avec le modèle estimé
- Calculer l'Ecart Quadratique Normalisé (par la variance de prédiction) Moyen sur tous les *x(i)* :

$$EQNM = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{(X_{s_i} - \widehat{X}_{s_i})^2}{\tilde{\sigma}^2_{s_i}}$$

- Si l'*EQM* proche de 1, valider le modèle (à 95% de sécurité) :

$$|EQNM - 1| \leq 1.96\sqrt{\frac{2}{n}}.$$

Exemple : validation du modèle de Matern

(données suisses)

Modèle de Matérn et trois méthodes d'estimation (MCO, MCG et MV) pour données « pluies suisses ».

	$\hat{a}$	$\hat{\sigma}^2$	$\hat{\nu}$	EQNM
MCO	17.20	15135.53	1.21	1.37
MCP	18.19	15000.57	1.00	1.01
MV	13.40	13664.45	1.31	1.09

Validation par bootstrap paramétrique

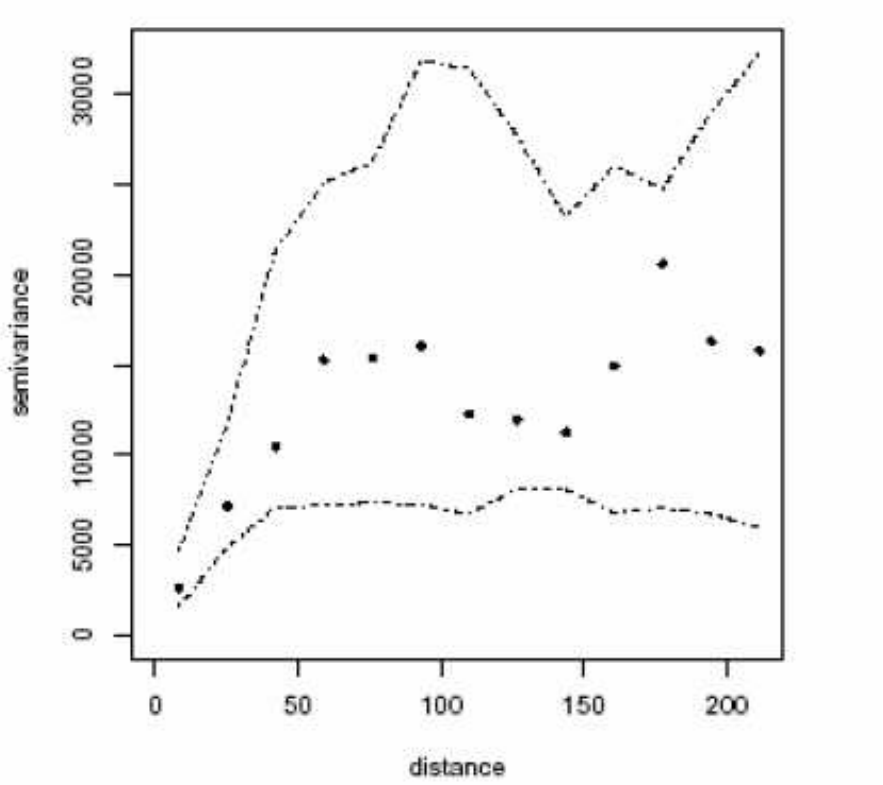
- Modèle paramétrique → estimation du paramètre
- m simulations des données sous le modèle estimé
- pour chaque simulation → variogramme empirique
- enveloppes inférieure + supérieure des variogrammes empiriques

  → *bande de confiance* au niveau $\alpha = (1- 2/(m+1))$
- Si le variogramme empirique des données initiales dans la bande de confiance, le modèle est validé.

Validation du modèle de Matern

(données Parana)

- m = 40 simulations sous le modèle de Matern estimé
- intervalle de confiance à 95% pour le variogramme aux 13 distances
- contient les variogrammes empiriques → *modèle de Matern valide*



Bande de confiance, validation de modèle

- `variog.model.env`

  Répétition de simulations d'un modèle (donné ou estimé) aux sites d'observations (modèle gaussien)

  → variogrammes empiriques pour chaque simulation

  → bande de confiance pour le variogramme

  → si variogramme théorique dans la bande → modèle valide

- `xvalid`

  validation croisée via le krigeage : chaque observation est comparée à sa prédiction à partir des autres)

Une étude épidémiologique : prévalence du paludisme chez l'enfant

(donnée `gambia` de `geoR`, Diggle et altri)

- **Expliquer** la *prévalence du palud* (% d'enfants malades) dans un village `s`

  Covariables :

  → Existence ou non d'un centre de santé primaire

  → Un indice de végétation (données satellitaires)

  → Moustiquaire ou non

  → Si oui, traitée ou non

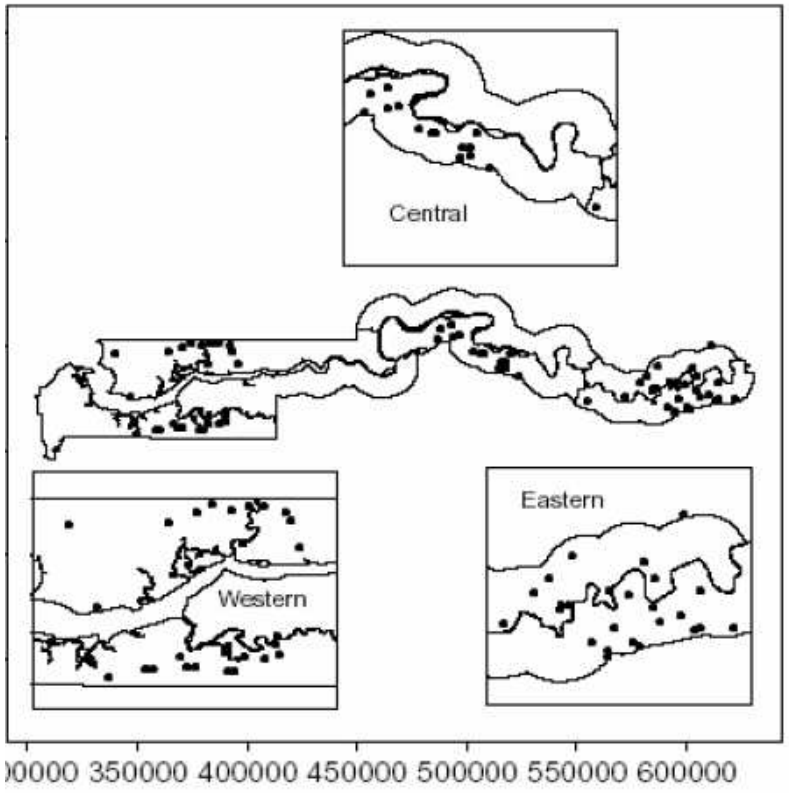
- **Question** : existe-t-il un facteur de risque spatial ?

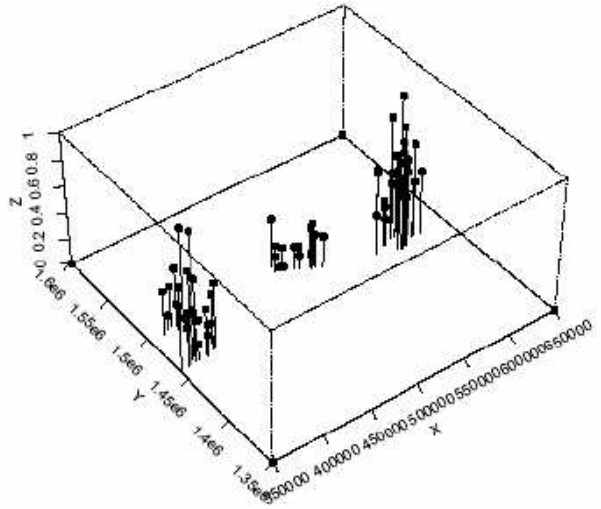
Données malaria en Gambie

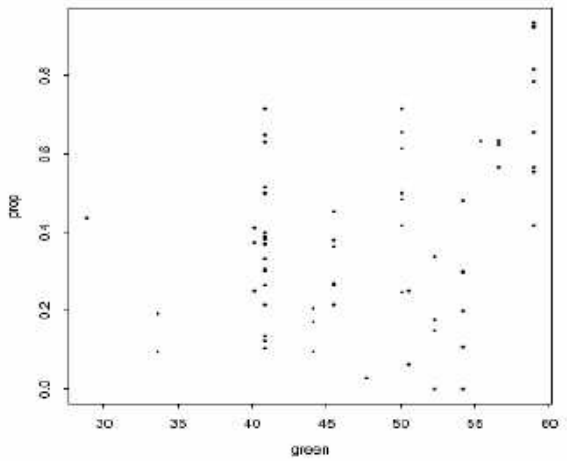
1 – localisations *s* des villages échantillonnés

2 – prévalence prop = y/n (y = nb de malades, n nb d'enfants)

3 – nuage (green,prop) pour indice de végétation green







Le modèle log-linéaire d'étude

- $Y_{i,s}$ = présence / absence du parasite dans le sang enfant i, village s
- p covariables $(z_{i,s,k}; k = 1, p)$: age, sexe, moustiquaire, traitée ou non, indice végétation ....

Modèle d'étude proposé : **régression Logistique**

$$\text{Logit } P(Y_{i,s} = 1) = \sum_{k=1}^{p} z_{i,s,k}\beta_k + U_s + S(x(s))$$

où $U_s \sim N(0, \nu^2)$ un résidu BBG habituel
$\{S(x) : x \in \text{Gambie}\}$ est un champ gaussien stationnaire

Analyse :

- présence de $S(x)$ affecte fortement l'estimation de β
- la carte de $\widehat{S}(x)$ montre un facteur de risque spatial

Géostatistique : bilan

- Inventaires des variables influentes disponibles
- Analyse graphiques préalables pour réduire leur nombre
- Propositions de modèles à l'ordre 1 (la tendance) et 2 (la covariance ou le variogramme).
- En particulier, choix a priori de régularité du variogramme
- Nuée(s) variographiques : isotropie ou non ?
- Estimation empirique puis paramétrique
- Validation de modèle (validation croisée, bootstrap paramétrique)
- Krigeage simple ou universel
- Cartes de krigeage : prédiction et précision….

Géostatistique avec *R* :
geoR, gstat, geoRlm et RandomFields

geoR

- Nombreuses données (***gambia, parana***, etc …)
- **Quelques exemples de programmes** :

geoR2RF : simulation d'un GMF (Gaussian Markov Field).

likefit : MV pour un GRF.

krige.conv : krigeage conventionnel.

plotvariogram : variogramme empirique.

variofit : MV/MC d'un modèle à partir du variogramme empirique.

xvalid : validation croisée d'un modèle de variogramme;

etc …

Géostatistique avec *R* (suite)

geoRglm : general linear spatial modèle.

gstat : Modélisation, estimation, prédiction en géostatistique uni-multidimensionnelle.

Random Fields : simulation et analyse des champs aléatoire (RF) gaussiens. Exemple de « package » :

CondSimul : simulation conditionnelle.

fitvario et ***mleRF*** : MC et MV pour modèles de RF.

Modèle sur un réseau discret

SAR ou Champ de Markov

Deux différences entre ces 2 familles :

(a) Spécificité des états E

(b) linéarité ou non du modèle

- Pour *AR spatial* : ***E = R*** ou ***R**d*** + modèle *« linéaire » d'équations Simultanées (SAR gaussien ou non)*

- Pour *Champ de Markov* : *E général* (i.e. ***{0,1}, fini, N, R, R+, R**d*** etc…) et *modèle conditionnel* (en général) *non linéaire*

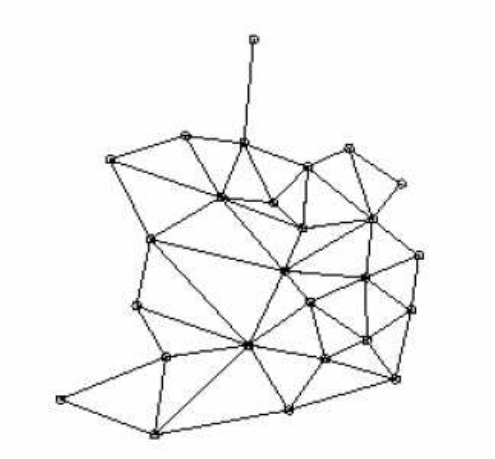
Pour ***E = R*****,** les *CAR* sont aussi *Markov*

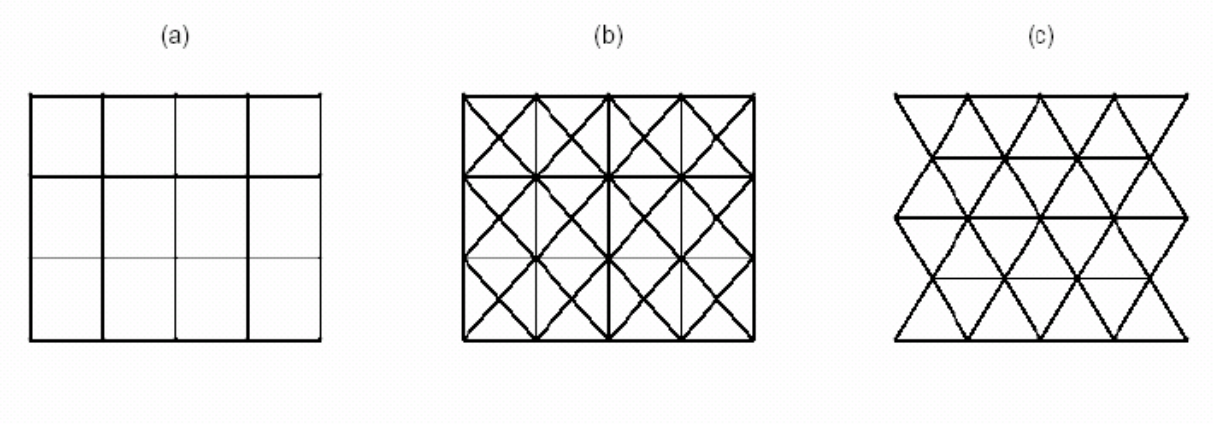
(I) Champ de Markov

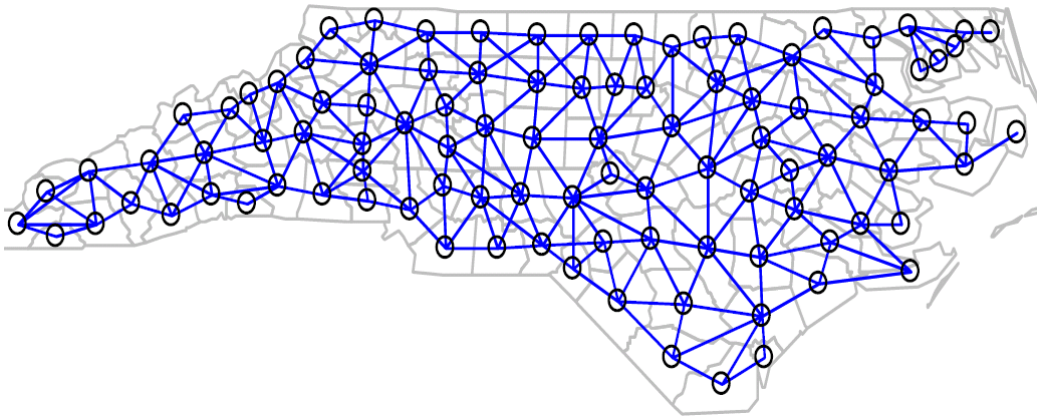
Champ de Markov sur réseau

- Valables pour un espace d'états général (pas limité à **R**).
- Lattice régulier (imagerie, agronomie) ou non (épidémiologie, , environnement, etc…)
- Modèle définit par ses spécifications conditionnelles locales.
- Outils spécifiques : simulation MCMC, estimation PVC.

Exemple de réseau : *eire*, 3 réseaux réguliers, et *sids*







Champ de Markov sur *S* fini

- *S* réseau fini (régulier ou non)
- Loi de *X* caractérisée par ses conditionnelles
- Loi conditionnelle est « locale »
- Espace d'état *E* général : binaire, fini, N, R+, R, R**p, mixte (gris x variété), etc

$$\pi_A(x_A|x^A) = \pi_A(x_A|x_{\partial A}).$$

Champ de Gibbs

1. ***Potentiels*** réels ***Φ={Φ(x(A))}*** définis sur une ***famille de parties A*** de ***S***
2. Φ → ***énergie*** *U(Φ; Λ)* sur *Λ* conditionnelle *∂Λ*
3. S'assurer que *exp{U(Φ ; Λ)}* intégrable (potentiel admissible)
4. Le champ de Gibbs est de ***log-densité conditionnelle*** à *∂Λ* proportionnelle à *exp{U(Φ ; Λ)}*

Energie et loi conditionnelles d'un champ de Gibbs

Soit Λ une partie de S, $\partial\Lambda$ son voisinage

$$U_\Phi(x(\Lambda) \mid x(\partial\Lambda)) = \sum_{A:A\cap\Lambda\neq\emptyset} \Phi_A(x(A))$$

et loi conditionnelle

$$\pi(x(\Lambda) \mid x(\partial\Lambda)) = Z^{-1}(x(\partial\Lambda)) \times \exp U_\Phi(x(\Lambda) \mid x(\partial\Lambda))$$

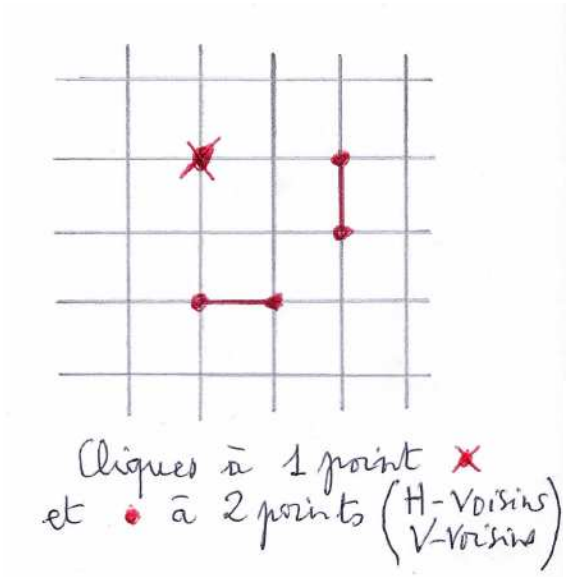
Spécification de Gibbs

- Famille des parties *A* sur lesquelles sont définit les potentiels
- Les potentiels *Φ(A)*
- Vérifier l'admissibilité de *exp U(Φ)*
- **Exemple :** famille exponentielle de potentiels de paramètre *θ*

$$\Phi_A(y) = \langle \theta, \phi_A(y) \rangle \text{ où } \phi_A \in \mathbb{R}^p \text{ connues,}$$

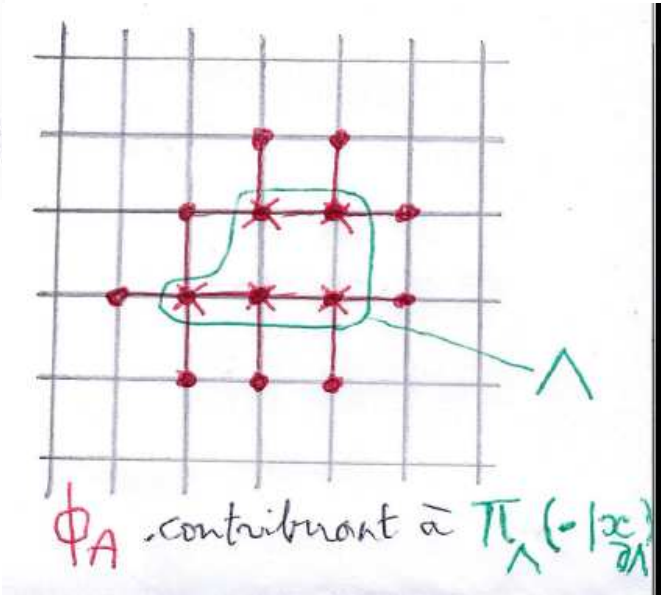
Exemple de potentiels contribuant à une loi conditionnelle (loi aux 4 ppv)

- Cliques à un point *{x}*
- À deux points ●----●



- Potentiels contribuants à *π(Λ / ∂Λ)*

→



Modèle d'Ising : état *E = {-1,+1}* et sites *S = {1,2,….,n}**2*

- **Cliques** : singletons et paires de ppv (plus proche voisin)
- **Potentiels :** *Φ(x(i))=α.x(i)* et *Φ(x(i),x(j))=β.x(i).x(j)*
- **Energie :** $$U_\Lambda(x_\Lambda|x^\Lambda) = \alpha \sum_{i\in\Lambda} x_i + \beta \sum_{i\in\Lambda,\ j\in S\ :\ \langle i,j\rangle} x_i x_j,$$
- **loi conditionnelle en *i* :**

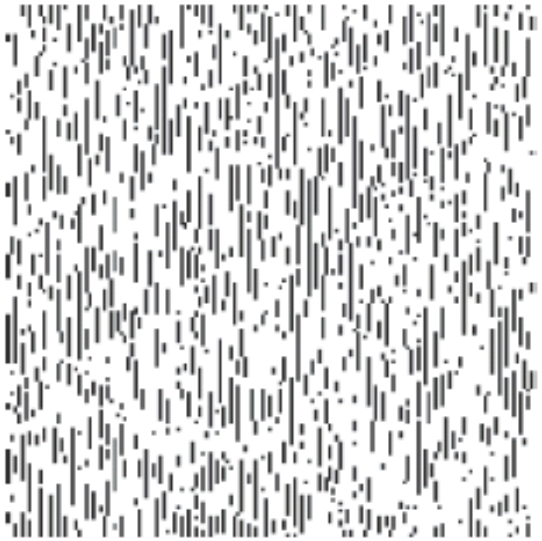
$$\pi_i(x_i|x^i) = \pi(x_i|x^i) = \frac{\exp x_i(\alpha + \beta v_i(x))}{2ch(\alpha + \beta v_i(x))}$$

Généralisations du modèle d'Ising

- **Etats** *{0,1}* : présence - absence (écologie); sain - malade (épidémiologie)
- **Plus d'états :** niveaux de gris, *E* fini (*K* variétés)
- **Anisotropie** : *β(H)* pour horizontal, *β(V)* pour vertical
- **Non stationnaire** : *α(i)* et *β(i,j)* suivant les sites *i, j*
- **Élargissement du voisinage** *∂i* : i.e. aux 8 ppv
- **Potentiels de triplets, quadruplets ….**
- **Simulations par MCMC** (échantillonneur de Gibbs)

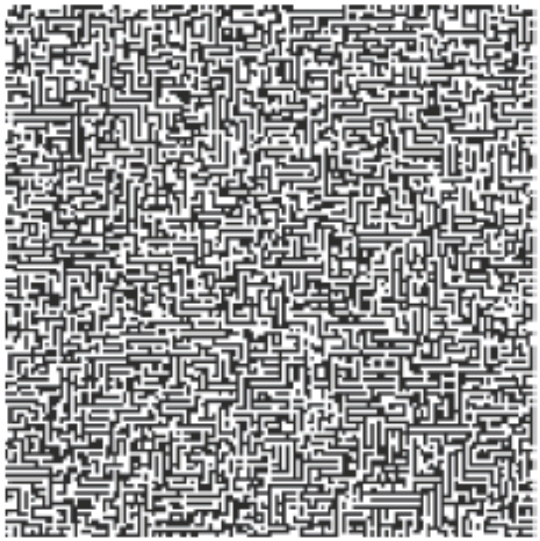
Exemples : 3 textures binaires aux 8 – ppv

- Potentiels au plus de paires → 5 paramètres
- Simulation par *échantillonneur de Gibbs* (*AntsInfields*)
- Arrêt après 3000 itérations



$$\begin{matrix} 0.0 & 1.0 & 0.0 \\ -1.0 & \boxed{2.0} & -1.0 \\ 0.0 & 1.0 & 0.0 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} 3.0 & 1.0 & 0.0 \\ -1.0 & \boxed{0.0} & -1.0 \\ 0.0 & 1.0 & 3.0 \end{matrix}$$



$$\begin{matrix} -0.4 & 0.4 & -0.4 \\ 0.4 & \boxed{0.0} & 0.4 \\ -0.4 & 0.4 & -0.4 \end{matrix}$$

Modèle de Gibbs à nombre d'états fini (modèle de Potts)

- **Etats** *: E = {a(1),a(2),…,a(K)}, K* états
- **Potentiels** : singletons et paires de sites voisins

$$\begin{aligned} \Phi_{\{i\}}(x) &= \alpha_k, && \text{si } x_i = a_k, \\ \Phi_{\{i,j\}}(x) &= \beta_{k,l} = \beta_{l,k}, && \text{si } \{x_i, x_j\} = \{a_k, a_l\} \end{aligned}$$

- **Energie** : *n(k)* = nb sites modalité *k; n(k,l)* = nb de sites voisins de modalités *(k,l).*

$$U(x) = \sum_k \alpha_k n_k + \sum_{k<l} \beta_{kl} n_{kl}$$

Modèle de Potts échangeable

Très utile en traitement d'image

- Tous les états ont un comportement analogue c'est-à-dire : $\alpha(k) = \alpha$ et $\beta(k,l) = \beta$ pour tout k,l

- Dans ce cas il y a un seul paramètre de dépendance spatiale β et la loi jointe vaut :

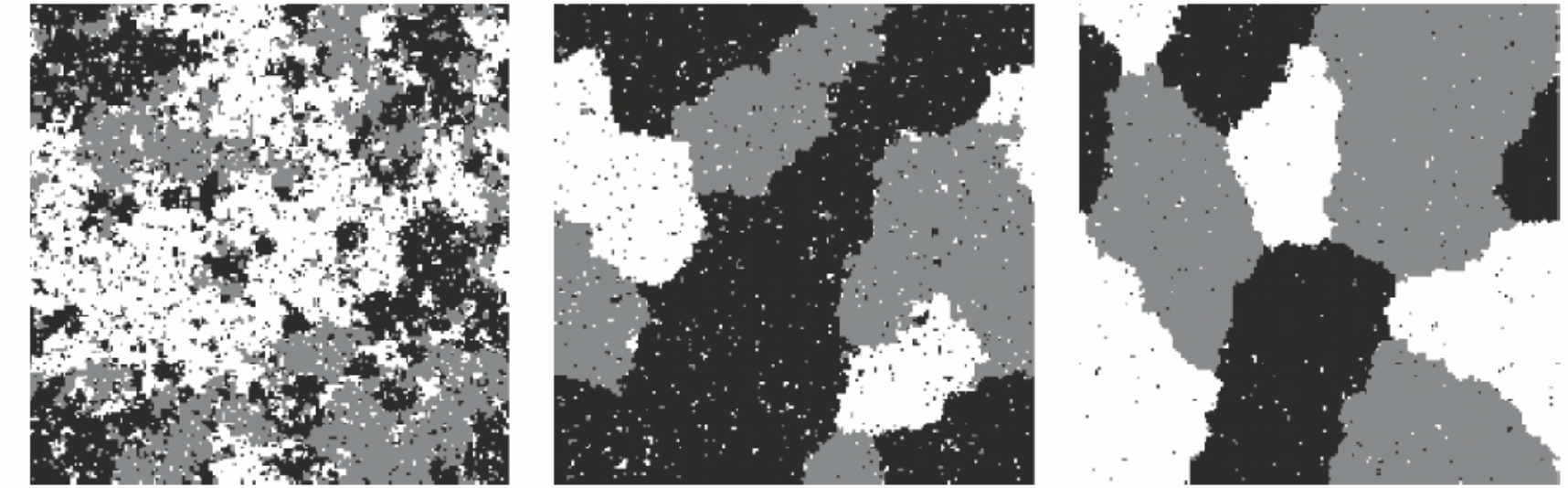
$$\pi(x) = Z^{-1} \exp\{-\beta n(x)\}$$

Modèle échangeable à 3 états

$\beta \uparrow$ augmente la régularité géométrique des plages constantes

(a) $\beta = 0.5$ (b) $\beta = 0.6$ (c) $\beta = 0.7$

(*Echantillonneur de Gibbs* à 5000 itérations avec *AntsInFields*)



Un champ gaussien est un champ de Gibbs

- **Soit *X = N(μ , ∑)*** de moyenne *μ* et covariance ∑ (*Q* inverse ∑)
- **Alors *X*** est de Gibbs avec :
  - → potentiels de *singletons* et de *paires*
  - → *énergie – U*
- Obtention des lois conditionnelles comme champ de Gibbs

$$U(x) = \frac{1}{2}\,{}^t(x-\mu)Q(x-\mu),$$

de potentiels de singletons $\Phi_{\{i\}}$ et de paires $\Phi_{\{i,j\}}$:

$$\Phi_{\{i\}}(x) = x_i \sum_{j:j\neq i} q_{ij}\mu_j - \frac{1}{2}q_{ii}x_i^2 \quad \text{et} \quad \Phi_{\{i,j\}}(x) = -q_{ij}x_ix_j \text{ si } i \neq j.$$

Simulation
d’un champ de Markov

Simulation par dynamique de chaîne de Markov

(MCMC pour *Monte Carlo Markov Chain*)

- **Objectif** : simuler une loi Π sur E
- **Principe MCMC** : construire une **chaîne de Markov** $(X(n), n>0)$ sur E de **transition** $P(x,\bullet)$ t.q. :

1 – P est **irréductible** (tous les états communiquent),

2 – P est $\boldsymbol{\Pi}$ **- invariante** ($\Pi P = \Pi$)

3 – P est **apériodique**

Propriété : Si (1-2-3), la loi de $X(n)$ tend vers Π

Irréductible, invariance et apériodicité

- **Irréductible** : la chaîne *P* fait communiquer tous les états de *E* entre eux
- ***Π* - invariante** (*ΠP = Π*) : si la loi de *X(n)* est *Π*, celle de *X(n+1)* est encore *Π* (*Π* est la loi invariante de la chaîne)
- **Périodique** : si il existe une partition *{E(1),E(2),…,E(k)}* de *E* t.q. la chaîne circule successivement dans *E(1)→E(2)→…E(k)→E(1) etc*
- **Apériodique** : si non périodique

Comment construire une telle chaîne ?

- ***Apériodicité* et *irréductibilité*** se vérifient au cas par cas

- Pas facile de trouver *P* qui soit *Π* - invariante : *Π* est vecteur propre de *P* associée à la valeur propre *1 !*

- Condition suffisante assurant la ***Π* – invariance** de *P* : la ***Π* – réversibilité** :

  pour tout ***x, y*** **:** $\Pi(x)P(x,y) = \Pi(y)P(y,x)$

Deux algorithmes markoviens classiques

- **Echantillonneur de Gibbs** sur un espace produit *E**S : S={1,2,…,n}* ensemble des sites, état *E* en chaque site

- **L'algorithme de Metropolis** (espace *E* général)

Pour l'un et l'autre, la transition P, est, par construction, *Π* – réversible, donc *Π* – invariante

→ **simulateur MCMC** de *Π* si on vérifie de plus que *P* est apériodique et irréductible

Simulation par échantillonneur de Gibbs d'une loi π sur $E^{**}S$

- Loi π sur espace produit $E^{**}S$
- Connaître les lois conditionnelles en tout i : $\pi_i(y_i|x^i)$

- Relaxation « site par site» sur S suivant la conditionnelle :

$$P_i(x,y) = \pi_i(y_i|x^i)1(x^i = y^i)$$

- Un « balayage» de S : itérer de $i = 1, n$ → la transition P
- Itérer les balayages
- **Propriété :** P est π – *réversible.*

Donc l'échantillonneur de Gibbs simule approximativement π

Après un grand nombre de balayages de S.

Transition pour un balayage de *S*

- Visite séquentielle de *S* : *1 → 2 → 3 →.... → n*
- Au *i-ème* pas, relaxation au site *i*
- Enchaînement sur un balayage donne la transition :

$$P_S(x,y) = \prod_{i=1}^{n} \pi_i(y_i | y_1, \ldots, y_{i-1}, x_{i+1}, x_{i+2}, \ldots, x_n)$$

La transition *P* de l'algorithme de Métropolis

- *Π* loi sur espace d'état *E* général, *x, y* deux états

Construction de *P* en **deux étapes** :

1 – *Proposition de changement* $x \rightarrow y$ suivant une transition $Q(x,y)$ symétrique (Q est la proposition de changement)
2 – *Acceptation du changement* avec une probabilité $a(x,y)$

Propriété : si $a(x,y) = \min\{1, \Pi(y)/\Pi(x)\}$, alors *P* est *Π* – réversible (donc *Π* - invariante)

Si de plus P est irréductibilité et apériodique, on a un autre algorithme de simulation de *Π*

Algorithme de Métropolis

1 - *x* état initial. Changement $x \rightarrow y$ suivant Q(x,y)
2 - Si $\Pi(y) \geq \Pi(x)$, garder *y*.
3 – Sinon, tirer *U* uniforme sur *[0,1]* :
(a) si $U > p = \Pi(y)/\Pi(x)$, garder *x*.
(b) Sinon, garder *y*.
4 – Revenir en (1)

L'algorithme de *Métropolis – Hastings* correspond à une proposition de changement *Q non symétrique*.

Remarque importante : il suffit de ***connaître Π à un facteur près*** pour construire cet algorithme (le cas pour *Π* de Gibbs).

Exemple : simulation d'un Ising isotropique aux 4-ppv

(I) - Par échantillonneur de Gibbs

Les lois conditionnelles en chaque site *i* sont explicites en terme de *v(i)*, la somme aux 4-ppv

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp\{\alpha \sum_i x_i + \beta \sum_{<i,j>} x_i x_j\},$$

$$\pi_i(x_i|x^i) = \frac{\exp x_i(\alpha + \beta v_i)}{2ch(\alpha + \beta v_i)}.$$

AntsInFields

« Boite noire » illustrant le livre de G. Winkler *(Springer, 2002)* :
« Image Analysis, random fields and dynamic MC Methods »

Largement buggée et non ouverte à la programmation.
Outil de démonstration, sur des thèmes d'analyse d'image et de statistique de champ de Gibbs.

Exemple : § 3 – 2

→ simulation **Ising** isotropique aux 4-ppv par échantillonneur de Gibbs *h=0, b=0, 0.2 et 0.4*. Voir petit à petit se former des plages

→ simulation d'un modèle de **Potts** à 4 niveaux de gris, paramètres : nombres de classes, h et b et distance retenue entre les configurations voisines

Simulation d'un Ising (suite)

(II) - Métropolis par échange de spins

1 - on tire au hasard 2 sites *i* et *j* et on permute les spins *x(i)* et *x(j)* : on passe ainsi de *x* → *y* avec une probabilité de transition *Q(x,y)*

2 – le quotient *Π(x)/Π(y) s'explicite facilement* en fonction de *x(i), x(j), v(i)* et *v(j)* (cf. poly)

3 – Mettre en œuvre Métropolis.

$$Q(x,y) = \begin{cases} \frac{2}{n^2(n^2-1)} & \text{pour un tel échange,} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Champ de Markov et champ de Gibbs

- *S={1,2;3, …., n}* et *G* graphe symétrique sur *S*
- *<i,j>* : *i* et *j* voisins pour *G.*
- *∂A =* voisinage de *A* pour *G*

  Clique de *G* : singletons + parties *A* t.q. les points de *A* sont tous voisins
- *C(G) =* toutes les cliques de *G*

  Champ de Markov :

$$\pi_A(x_A|x^A) = \pi_A(x_A|x_{\partial A}).$$

Le théorème de Hammersley – Clifford Gibbs ≡ Markov

- π un champ de Markov pour graphe G
- *Positivité* : pour tout x, $\pi(x)>0$

- **Propriété** (H-C) : alors π est- un champ de Gibbs dont les potentiels sont limités aux cliques de G

- **Réciproque** : tout champ de Gibbs est un champ de Markov pour le graphe engendré par les potentiels de Gibbs.

Recollement de lois conditionnelles

- **Objectif :** définir un modèle à partir de ses spécifications locales
- **En général**, des spécifications locales « ne se recollent pas »
- *E* sous ensemble réel
- Les spécifications de la « famille exponentielle » ci-dessous se recollent.

  Résultat : si pour tout *i*

$$\textbf{Recollement des } \pi(x_i \mid x_{\partial i})$$

$$\log \pi(x_i \mid x_{\partial i}) = A_i(x_{\partial i})B(x_i) + C(_i(x_i) + D_i(x_{\partial i})$$

$$\text{où } B_i(0) = C_i(0) = 0 \text{ et } A_i(x_{\partial i}) = \alpha_i + \sum_{j \in \partial i} \beta_{ij} x_j, \text{ et } \beta_{ij} = \beta_{ji},$$

$$\text{Alors} \implies \pi \textbf{ est un champ de Gibbs de potentiels :}$$

$$\Phi_i(x_i) = \alpha_i B_i(x_i) + C_i(x_i) \text{ et } \Phi_{i,j}(x_i, x_j) = \beta_{ij} B_i(x_i) B_j(x_j).$$

Auto – modèle de Besag (1974)

- *E* sous ensemble de *R*
- Famille exponentielle du type précédent

  Alors les lois conditionnelles se recollent en la loi de Gibbs π :

$$\pi(x) = Z^{-1} \exp\{\sum_{i \in S} \Phi_i(x_i) + \sum_{\langle i;j \rangle} \beta_{ij} x_i x_j\}$$

Auto-modèle de Markov : auto - régression pour espace *E* général

- *E = {0,1}* : **auto-logistique** (états binaires)
- *E = {0,1,2, …, K}* : **auto-binomial**
- *E = N* : **auto-poisson** (comptage en épidémiologie)
- *E = R+* : **auto-exponentiel** (Gamma), pluviométrie
- *E = R* (*R**d*) : **auto-gaussien**
- Possibilité d'ajouter des *covariables explicatives*

Modèle Auto-Logistique : *E = {0,1}*

- paramètre *θ(x(i))* et loi **Logit conditionnel**

$$\theta_i(x_i) = \{\alpha_i + \sum_{j:\langle i,j\rangle} \beta_{ij} x_j\},$$

$$\pi_i(x_i|x^i) = \frac{\exp x_i\{\alpha_i + \sum_{j:\langle i,j\rangle} \beta_{ij} x_j\}}{1 + \exp\{\alpha_i + \sum_{j:\langle i,j\rangle} \beta_{ij} x_j\}}.$$

- **L'énergie jointe** du champ de Gibbs est

$$U(x) = \sum_i \alpha_i x_i + \sum_{\langle i,j\rangle} \beta_{ij} x_i x_j.$$

- Généralisation à l'**auto-binomial**

Auto – modèle de Poisson : *E = N*

(comptage *en épidémiologie, etc)*

- la loi conditionnelle Poisson suit un MLG
- admissibilité : *β <0* (*compétition*)
- *coopération* possible en bornant *E* à *K*<∞

$$
\begin{aligned}
\text{Si } \forall i \quad &\in \quad S : \pi(x_i \mid x_{\partial i}) = \mathcal{P}(\lambda_i(x_{\partial i}), \text{ un MLG :} \\
\log(\lambda_i(x_{\partial i}) \quad &= \quad \alpha_i + \sum_{j \in \partial i} \beta_{ij} x_j \text{ où } \alpha_i + \sum_{j \in \partial i} \beta_{ij} x_j = \beta_{ji}. \\
\textit{Admissibilité} \quad &: \quad \forall i, j, \ \beta_{ij} < 0 \text{ (compétition).} \\
&\quad \text{Alors } \pi \text{ est d'énergie jointe} \\
U(x) \quad &= \quad \sum_{i \in S} \alpha_i x_i + \log(x_i!) + \sum_{\langle i,j \rangle} \beta_{ij} x_i x_j
\end{aligned}
$$

Auto – exponentiel : *E = R+*

(variable >0 : pluviométrie, etc)

- *loi conditionnelle exponentielle suit un MLG*
- *admissibilité : β <0 (compétition)*
- *coopération possible en bornant E à à K<∞*

$$\textbf{Auto-Exponentiel} \quad : \text{si} \quad \forall i \in S : \pi(x_i \mid x_{\partial i}) = \mathcal{E}\mathrm{xp}(\mu_i(x_{\partial i}), \text{ un MLG :}$$

$$\log(\mu_i(x_{\partial i}) \quad = \quad \alpha_i + \sum_{j \in \partial i} \beta_{ij} x_j \text{ où } \alpha_i + \sum_{j \in \partial i} \beta_{ij} x_j = \beta_{ji}.$$

$$\textit{Admissibilité} \ : \quad \forall i, j, \ \alpha_i > 0 \text{ et } \beta_{ij} \geq 0 \text{ (compétition).}$$

$$\text{Alors } \pi \text{ est d'énergie jointe}$$

$$U(x) \quad = \quad -\{\sum_{i \in S} \alpha_i x_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \beta_{ij} x_i x_j\}$$

Auto – modèle avec covariables *z*

- Il y a trop de paramètres *α* et *β* si le modèle est non stationnaire
- Modéliser les *α, β* à partir de covariables *z* :

  Exemple :

$$
\begin{aligned}
\text{Poids } \textit{connus} \quad &: \quad (a_i),\,(w_{ij}) \text{ symétrique} \\
\text{Covariable} \quad &: \quad z=(z_i),\, z_i \in \mathbb{R}^p \textit{ observable} \text{ sur } S \\
\beta_{ij} \quad &= \quad \delta w_{ij} \text{ et } \alpha_i = a_i \times {}^t\gamma z_i \\
&\Longrightarrow \quad \text{modèle à } (p+1) \text{ paramètres.}
\end{aligned}
$$

Estimation d’un champ de Markov

3 procédures

- **Max de Vraisemblance** : efficace, difficile (cste de normalisation) → méthodes numériques MCMC
- **Pseudo Vraisemblance Conditionnelle** (PVC) : facile à mettre en place, bonnes propriétés, proche MV si peu de dépendance spatiale.
- **Codage :** facile, moins efficace, test de chi2 direct

Maximum de vraisemblance sur *D(n)*

Vraisemblance conditionnelle à $x(\partial D_n)$:

$$\pi_n(x(D_n) \,/\, x(\partial D_n);\theta) = Z^{-1}(\partial D_n;\theta)\exp U(x(D_n) \mid x(\partial D_n);\theta)$$

où Z, la constante de normalisation, vaut (cas E fini) :

$$Z(\partial D_n;\theta) = \sum_{y(D_n)} \exp U(y(D_n) \mid x(\partial D_n);\theta).$$

- L'estimation du MV est convergente si *π* appartient à famille exponentielle invariante par translation (*S = Z**2*)
- Difficulté de calcul de la constante de normalisation *Z*

→ calcul de *Z* par MCMC ou par algorithme de score

Pseudo – Vraisemblance Conditionnelle

(PVC – Besag : 1974)

$$PVC_n(X) = \prod_{i \in D_n} \pi_i(x_i \mid x_{\partial i}; \theta)$$

Exemple auto -logistique isotropique aux 4 -ppv :

$$PVC_n(x) = \prod_{i \in D_n} \frac{\exp x_i(\alpha + \beta \sum_{j:\langle i,j \rangle} x_j)}{1 + \exp(\alpha + \beta \sum_{j:\langle i,j \rangle} x_j)}$$

- PVC = produit en chaque site *i* des probabilités conditionnelles
- *Bonne fonctionnelle* d'estimation (convergence, normalité sous des hypothèses raisonnables)
- Pour un CAR gaussien ≡ MCO sur les résidus
- Obtention estimation via logiciel dédié aux MLG ……
- **Attention** : *calcul spécifique* de la variance d'estimation

Influence du taux de nitrate des eaux sur la mortalité par cancer, Valence – Espagne

(Ferrandiz et al. Biometrics – 1995)

Auto modèle poissonnien (Y(i) variable de comptage);
Covariables : x(1)=% population > 40 ans; et x(2) = % nitrate dans l'eau.
Matrice de poids : fonction des populations u(i) et des distances d(i,j);

$$\langle i,j \rangle \text{ si } a_{ij} = \frac{\sqrt{u_i \times u_j}}{d_{ij}} > a \text{ et } \gamma_{ij} = \gamma \times a_{ij}$$

$$\log(\lambda_i) = \alpha + \log(u_i) + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \gamma \sum_{j\,:\,\langle i,j \rangle} a_{i,j} y_j$$

Influence du taux de nitrate dans les eaux sur la mortalité par cancer (suite)

$$\log(\lambda_i) = \alpha + \log(u_i) + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \gamma \sum_{j\,:\,\langle i,j\rangle} a_{i,j} y_j$$

Modèle	α	γ	β_1	β_2	χ^2
Constant	-7.3	*****	*****	*****	483.1
AR-Poisson : PVC	-7.76	$-6.28\ 10^{-9}$	*****	*****	384.2
MV	-7.76	$-6.52\ 10^{-9}$	*****	*****	363.2
Régression	–8.91	*****	2.96	$-1.96\ 10^{-3}$	323.2
Complet : PVC	-8.776	$-2.83\ 10^{-9}$	2.69	$-2.15\ 10^{-3}$	333.0
MV	-8771	$-2.80\ 10^{-3}$	2.67	$-2.17\ 10^{-3}$	309.1

Estimation et simulation de 3 textures binaires:

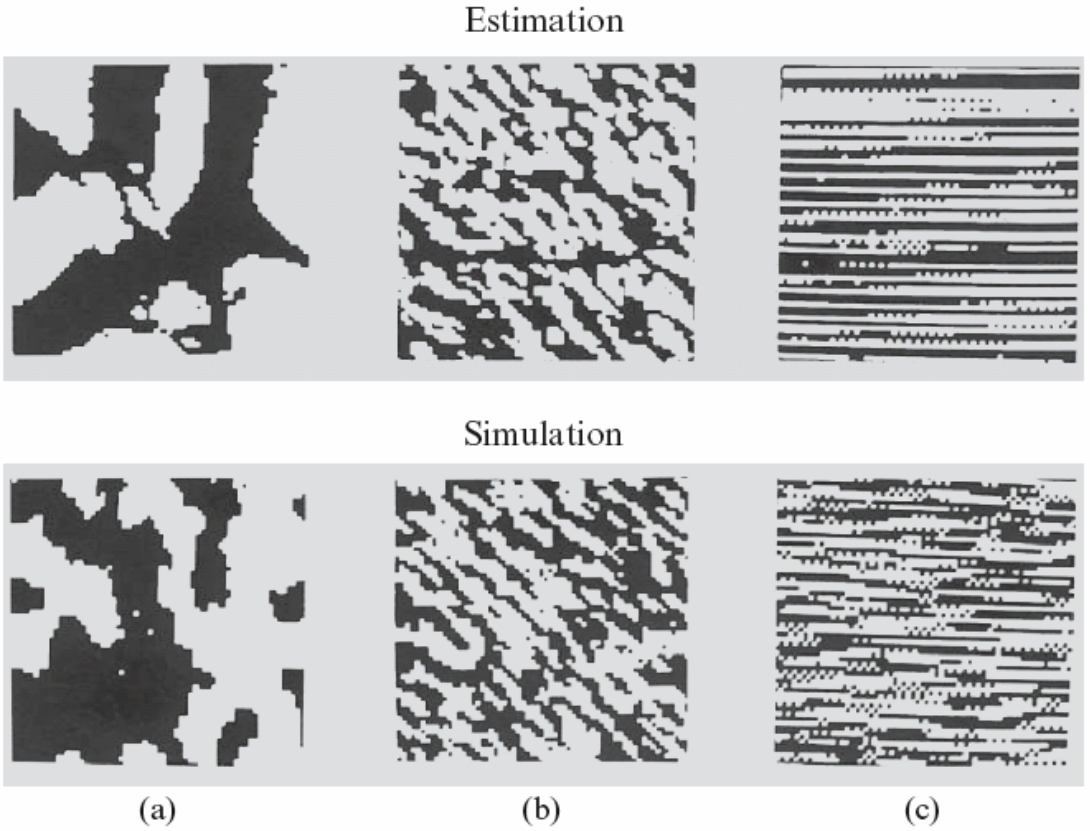
(a) cailloux; (b) liège, (c) rideau (Cross et Jain)

- 3 textures binaires réelles de taille 64 x 64 →

  Estimation par PVC de 3 modèle auto-logistique

- *Simulation* des textures → estimées (éch. de Gibbs)

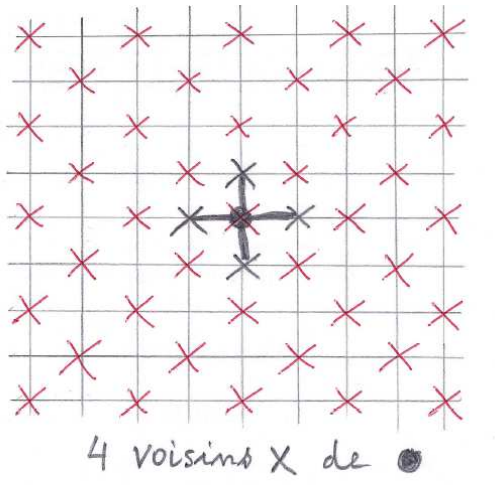
- **Bilan :** bonne adaptation de: (1) la modélisation Markov, (2) l'estimation par PVC et (3) la simulation par ech. de Gibbs.



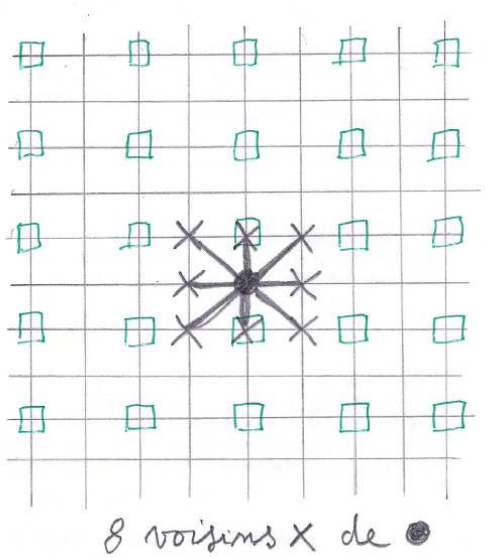
C « Codage » de *S*

Définition : *C* est un ***codage*** de *S* si 2 sites $s \neq t$ de *C* ne sont jamais voisins

- **Ex 1** : les x rouges pour la relation aux 4 ppv →



- **Ex 2** : les □ verts pour la relation aux 8 ppv →



Estimation par *C* - codage

- Soit *C* un ensemble de codage de *S*
- **La propriété fondamentale** : indépendance des *X(s), s* dans *C*, conditionnellement aux *x(S\C)* extérieurs
- La vraisemblance sur *C* conditionnelle aux *x(S\C)* est (exactement) *le produit des lois conditionnelles*

$$L_C(x(C) \mid x(S\backslash C)) = \prod_{i \in C} \pi_i(x_i \mid x(S\backslash C))$$
$$= \prod_{i \in C} \pi_i(x_i \mid x_{\partial i})$$

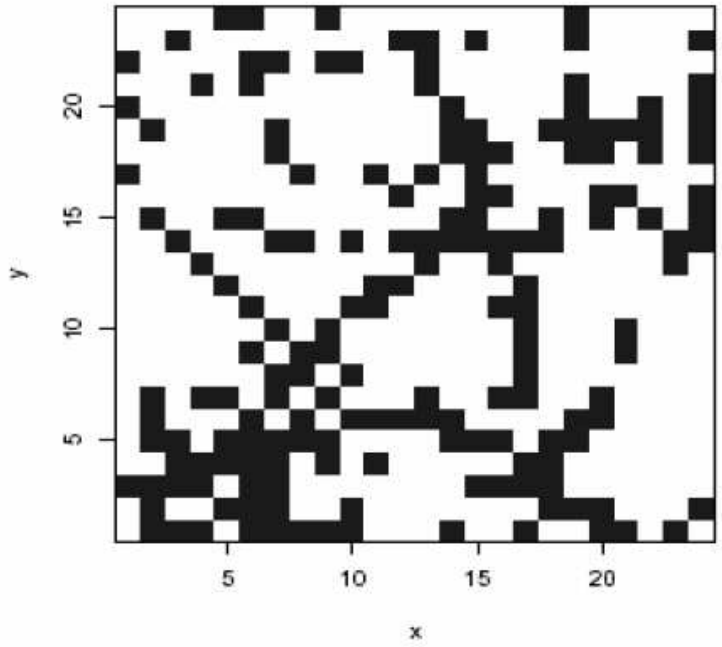
Conséquences

- Même propriétés que pour un estimateur du MV de variables indépendantes (i.n.i.d.)
- Normalité, test du chi2 d'une sous hypothèse
- Calcul de l'estimation et de la variance d'estimation avec un logiciel dédié aux MLG

- Plusieurs choix d'ensemble de codage possible, mais les estimateurs associés sont dépendants

Modèle de répartition spatiale d'une espèce végétale (présence / absence)

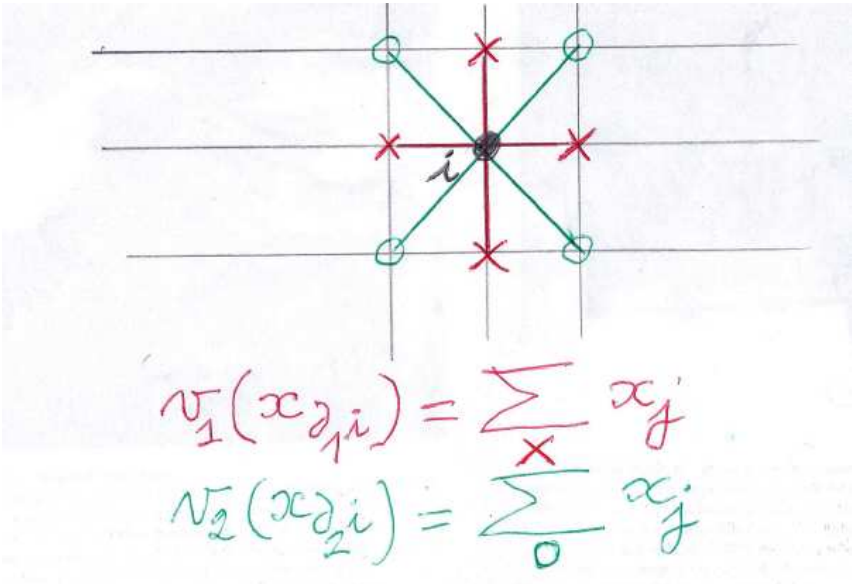
Variété : la grande laîche



(a) Présence (■) ou absence (□) de grande laîche.

2 modèles auto - logistiques :

(I) aux 4 – ppv (*v(1)*) - (II) aux 8 – ppv (*v(2)*)



$$P(X_i = 1 \mid x_j, j \neq i) = \frac{\exp V_i(x)}{1 + \exp V_i(x)} \text{ où}$$

(I) : $V_i(x) = \beta_0 + \beta_1 v_1(x_{\partial_1 i})$, où $v_1(x_{\partial_1 i})$ est la somme des 4 p.p.v.

(II) : $V_i(x) = \beta_0 + \beta_1 v_1(x_{\partial_1 i}) + \beta_2 v_2(x_{\partial_2 i})$,

$v_2(x_{\partial_2 i})$ est la somme des 4 voisins à distance $\sqrt{2}$ (voisins diagonaux)

Résultats : estimations MV, PMV et codage

	β_0		β_1		β_2	
			Codage			
I	-1.486	(0.235)	0.497	(0.133)	-	
II	-2.093	(0.442)	0.477	(0.223)	0.391	(0.213)
			Pseudo - Vraisemblance			
I	-1.552	(0.172)	0.531	(0.098)	-	
II	-1.884	(0.206)	0.433	(0.102)	0.350	(0.106)
			Maximum de Vraisemblance			
I	-1.645	(0.196)	0.612	(0.129)	-	
II	-1.888	(0.229)	0.441	(0.137)	0.360	(0.152)

Logiciel pour les champs de Markov

- ***R*** ne fait pas grand-chose en dehors des champs gaussiens.
- Simulation de textures générales : ***AntsInFields*** (Winkler), logiciel gratuit téléchargeable.
- Pour l'estimation par PVC ou par codage, on peut utiliser un logiciel dédié aux **modèles linéaires généralisés** : ils donneront la bonne estimation.

  Attention : si la variance donnée est correcte pour l'estimation par codage, elle ne l'est plus pour l'estimation par PVC.

  La variance de l'estimation par PVC doit se calculer analytiquement ou par Monte Carlo à partir de la formule adéquate.

(II) – Modèle AR spatial

(II) - Modèle AR spatial

- L'espace d'état est **E = R** ou **R**p**

- Le modèle est définit par un ensemble *d'équations « spatiales » simultanées* (comme en économétrie) en référence à un graphe d'influence

- Le bruit de modèle est blanc (*SAR*) ou coloré (*CAR*)

- Souvent le modèle est supposé gaussien

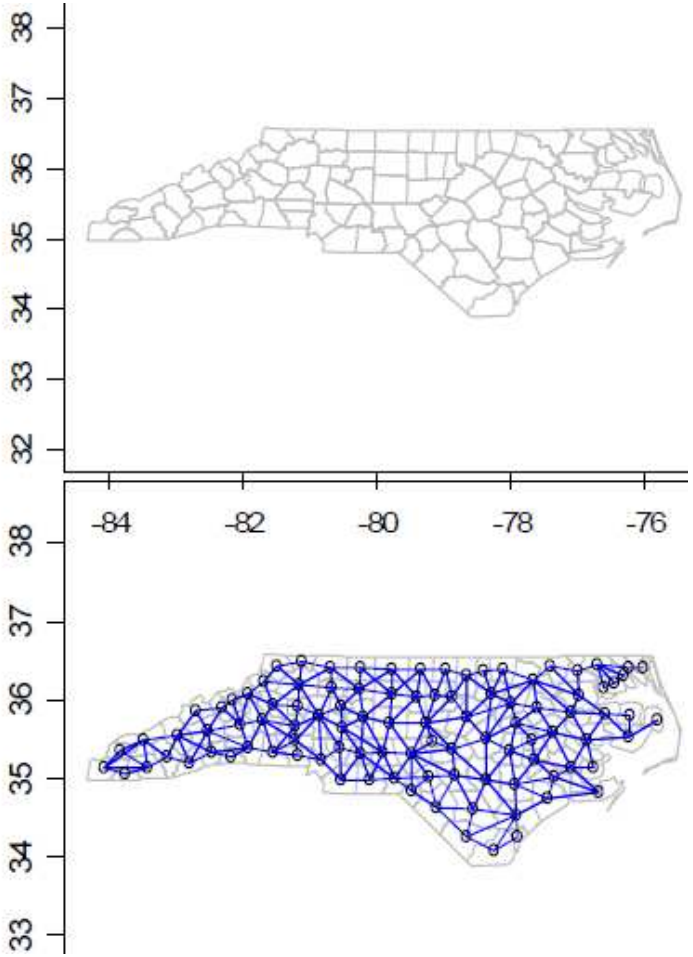
Ex 1 : la mort subite du nourisson

(données *sids* de *spdep*, Cressie et al)

- X(s) = taux de ***sids*** pour le canton s (*sudden infant deaths* in north carolina 74-78)
- Régions et graphe de voisinage

Covariables :

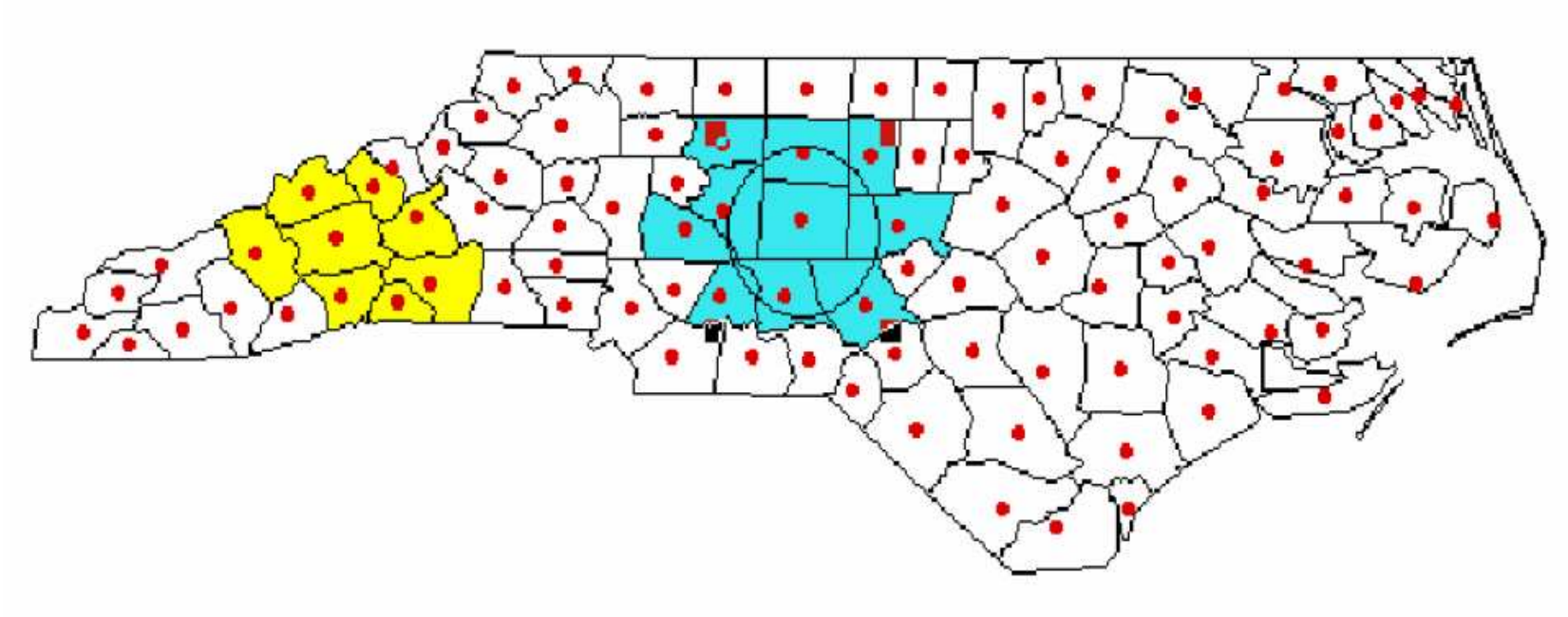
- Nombre de naissances,
- Pourcentage de bébés de chaque communauté,
- Variables socio-économiques, etc …



Ex. de système de voisinage

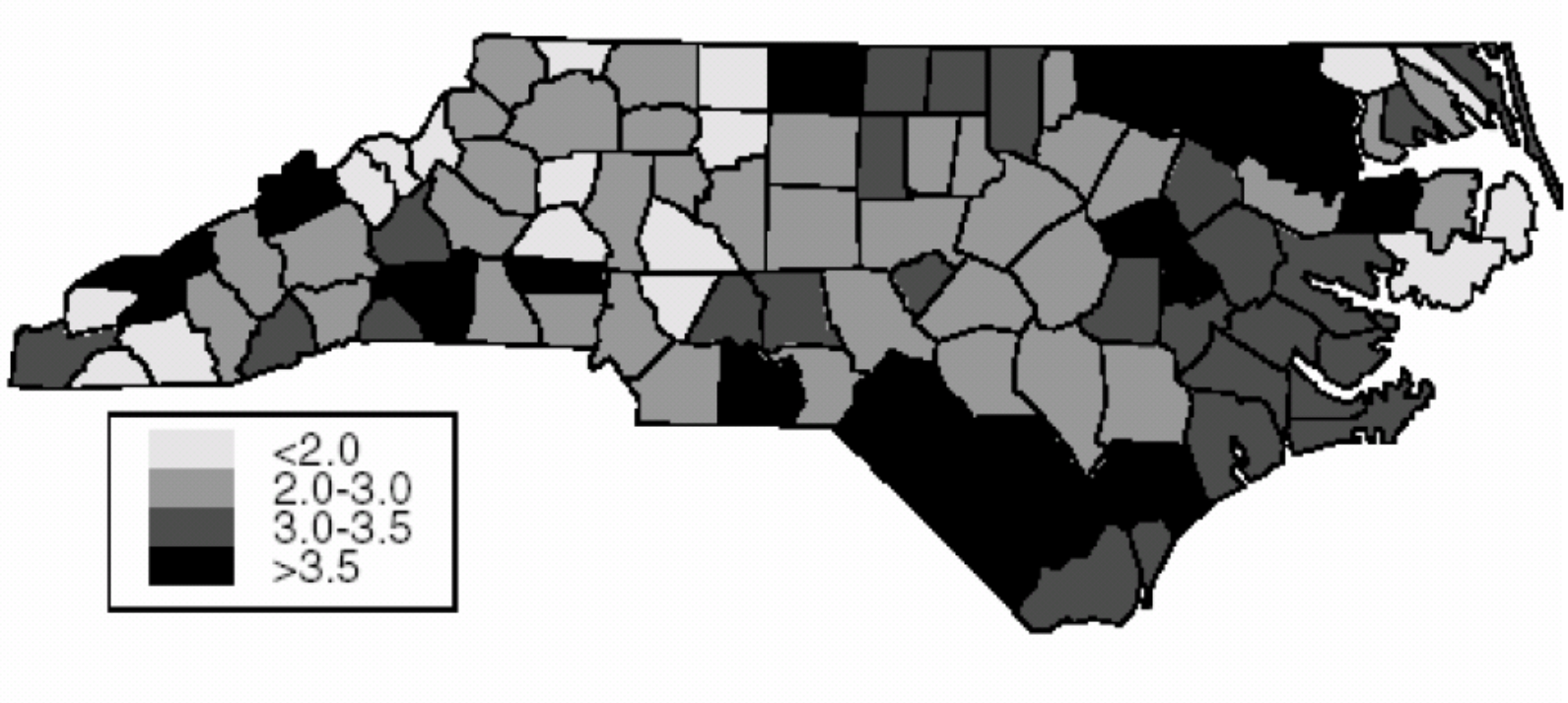
à gauche : cantons avec frontière commune

à droite : centres sont à moins de 30 miles



Données latticielles : « la mort subite du nourrisson »

Nombre de cas dans 100 comtés de Caroline du nord entre 1974-1978 (données ***sids*** de ***R***; Cressie,1993)



`nc.sids` dans le package `spdep`

- Voir le descriptif de `nc.sids`
- Représentation des 100 comtés et des 21 variables
- Graphes de voisinage

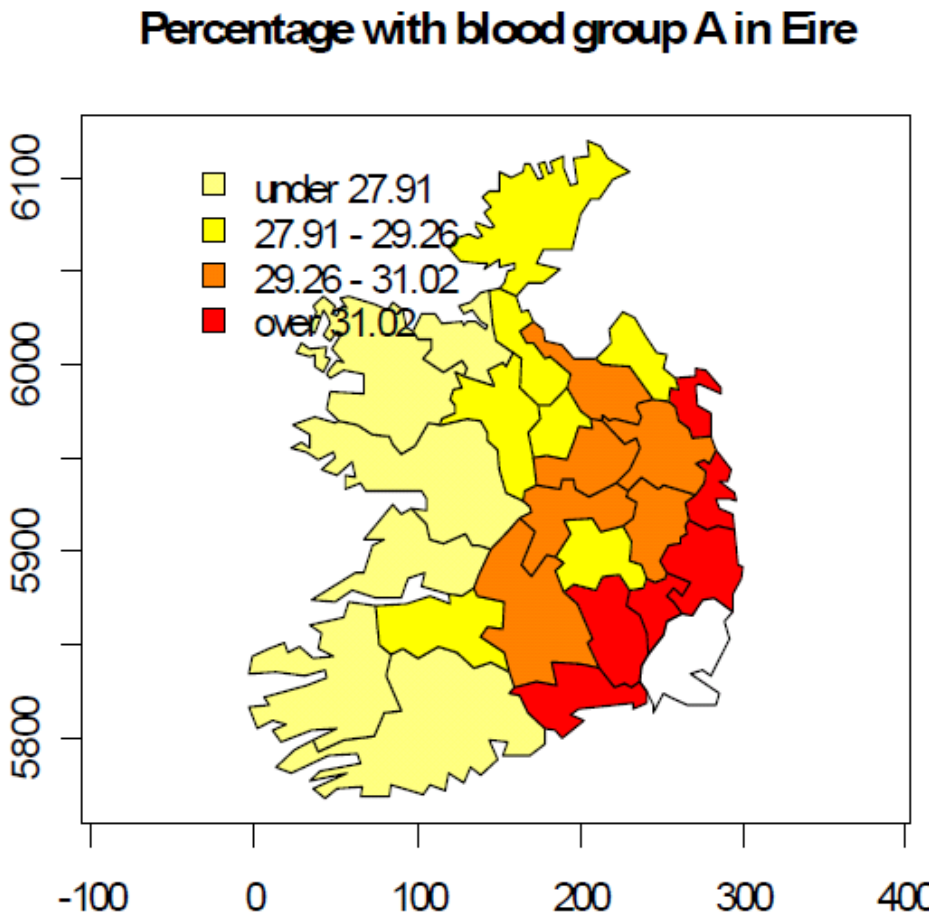
Ex. 2 : Taux groupe sanguin A

36 contés de l'Irlande (données *eire*)

- X(s) = % du groupe A dans le comté s

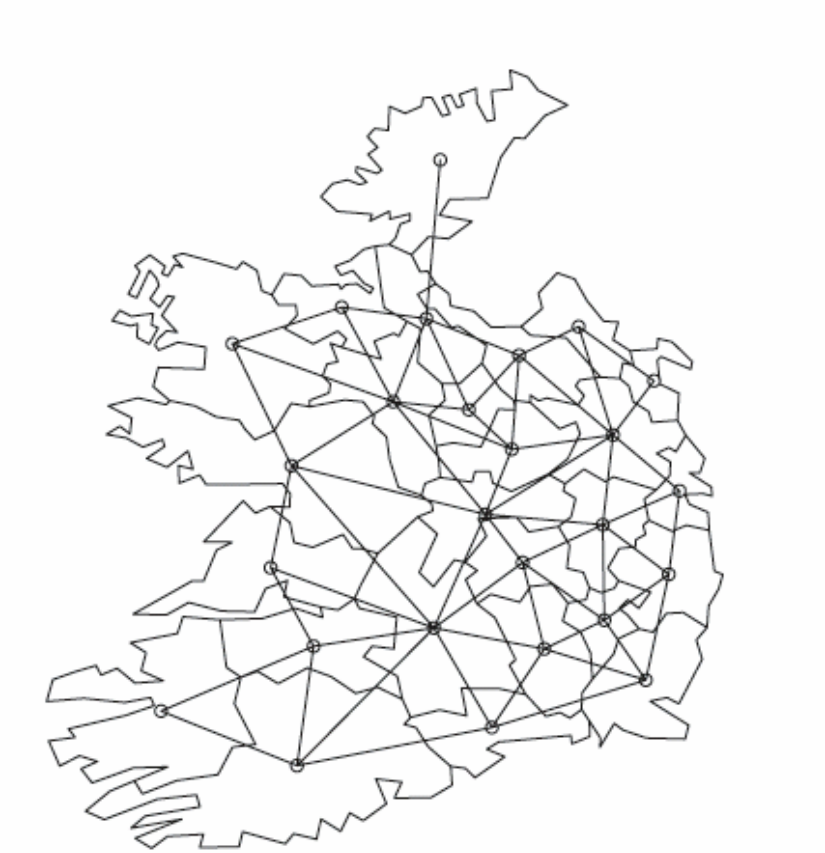
Covariables :

- Taux d'urbanisation (***towns***);
- Anciennement sous contrôle anglais (***pale***);
- Et d'autres ,….



Graphe de voisinage, données *eire*

« avoir de la frontière commune »



Réseau régulier (agronomie, télédétection) **ou non**

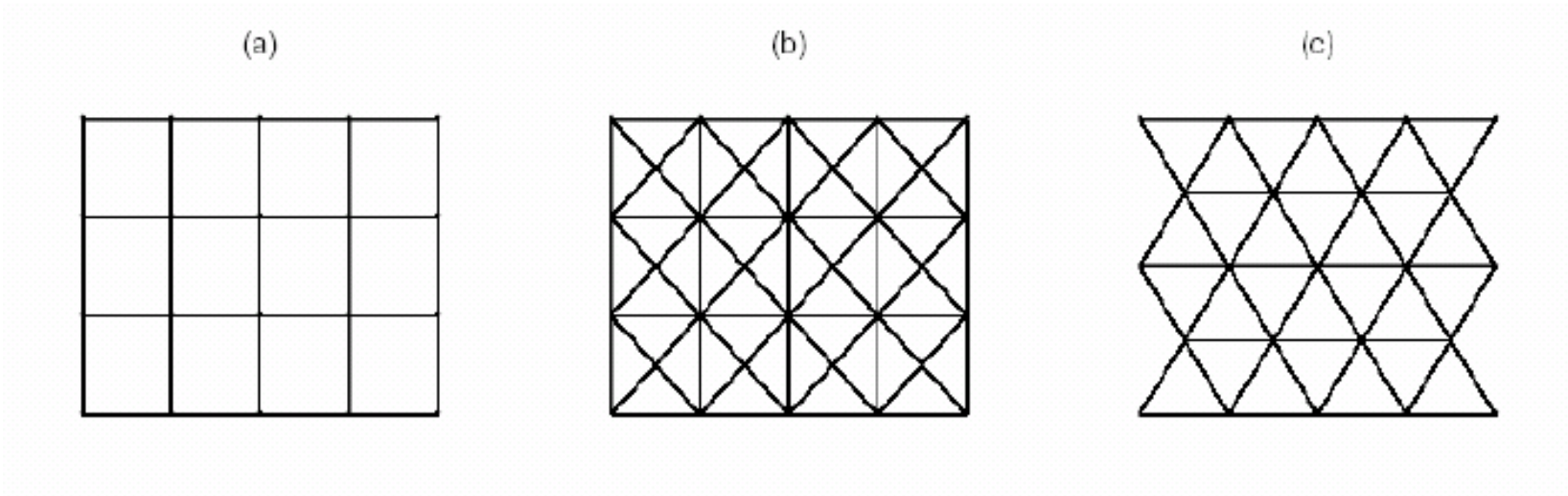
Choix du graphe de voisinage reste à faire

Exemples de graphes réguliers symétriques :

(a) Lattice carré : voisinage aux *4 plus proches voisins* (**p.p.v.)**

(b) Lattice carré : voisinage aux 8 **- ppv**

(c) Lattice triangulaire : voisinage aux 6 **- ppv**



SAR général sur *S = {1,2, …., n}*

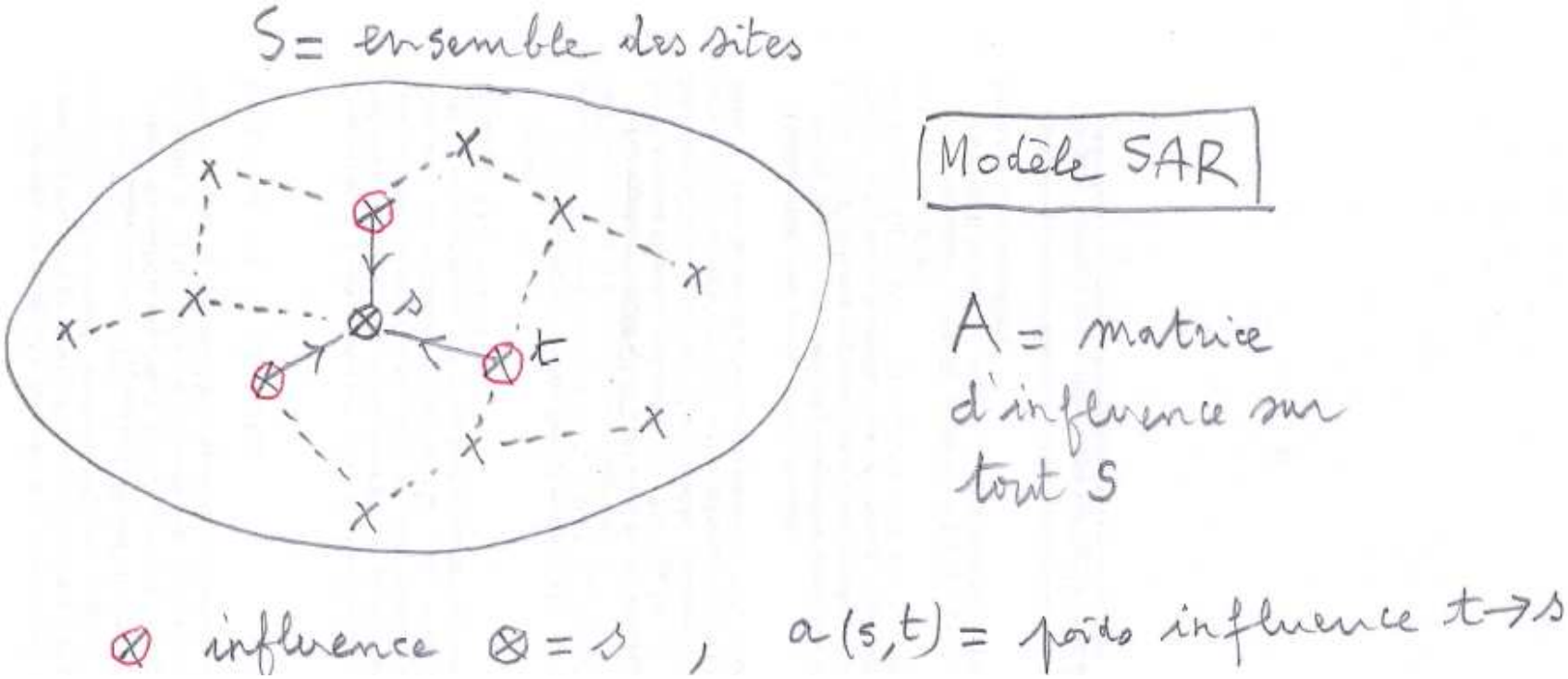
- recentrage de *X*
- **Graphe** et **poids** d'influence W + **Bruit**
- *n* équations simultanées de paramètres *A* avec *ε BB*
- *X* existe si *A* inversible
- Covariance ∑ en termes des paramètres *A*

$$X_t - \mu_t = \sum_{s \in S : s \neq t} a_{t,s}(X_s - \mu_s) + \varepsilon_t \text{ ou}$$

$$A(X - \mu) = \varepsilon, \text{ définie si } A^{-1} \text{ existe.}$$

$$\Sigma^{-1} = \sigma_\varepsilon^{-2}\{{}^t AA\}$$

SAR **général** : graphe et poids



Spécifier une *SAR*

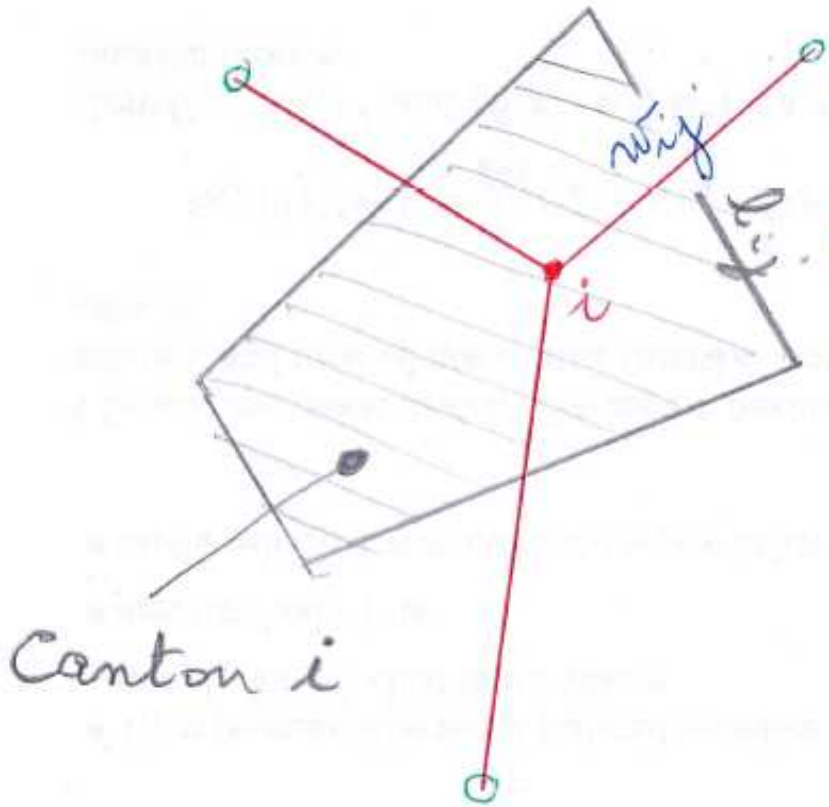
- ∂s = voisins de s (symétrique ou non)
- Dépendance « locale » : $X(s) = F\,(\,X(\partial s), \theta) + \varepsilon(s)$
- F linéaire via θ inconnu et W matrice de poids connus

  $W=\{W(t,s),\ t$ voisins de $s\}$
- ε un BB (éventuellement gaussien)

Exemple : ρ = corrélation spatiale, $(I- \rho W)$ inversible

$$X_t = \rho \sum_{s:s\neq t} w_{t,s} X_s + \varepsilon_t, \text{ ou } X = \rho W X + \varepsilon.$$

Choix de la matrice de poids de Voisinage W



- j = cantons voisins
- w_{ij} = distance (i, j)
  = fonction d(i, j)
  = % perimètre de i partagé avec j
  = l_{ij} / l_i etc ...

Choix ad hoc de W

- Fonction des distances inter-centres, des (portions) de frontières communes, des réseaux de communications entre deux cellules, etc…
- Paramètres γ et τ préalablement calibrés

- $w_{ij} = ||\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j||^{-\gamma}, \gamma \geq 0$
- $w_{ij} = \exp\{||\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j||^{-\gamma}\}$
- $w_{ij} = (l_{ij}/l_i)^{\gamma}$ where l_{ij} is the length perimeter of the border of area i
- $w_{ij} = (l_{ij}/l_i)^{\tau}/||\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j||^{-\gamma}$.

SAR stationnaire sur *Z**2

- bruit blanc : η_t (gaussien ou non)
- Équations avec variables «spatialement retardées»

$$X_t = \sum_{s \in R} a_s X_{t-s} + \eta_t.$$

- *X* existe si *P ≠ 0* sur le tore :

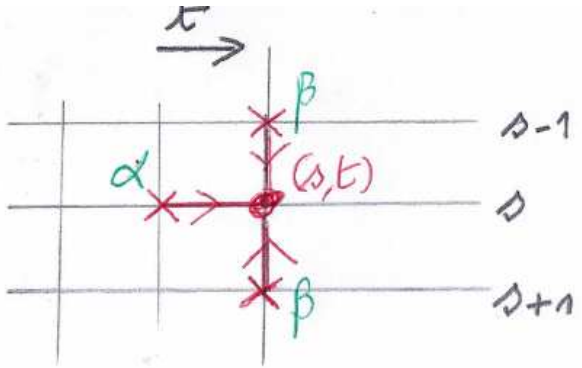
$$P(e^{i\lambda}) = 1 - \sum_{s \in R} a_s e^{i\,t\,\lambda s}.$$

- Graphe *R* de voisinage orienté (ou non)

Exemples de SAR

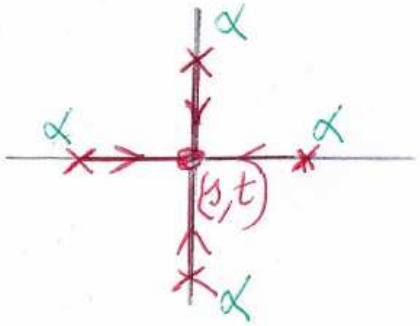
Semi causal Espace x Temps

$$X_{st} = \alpha X_{s,t-1} + \beta (X_{s-1,t} + X_{s+1,t}) + \eta_{st}$$



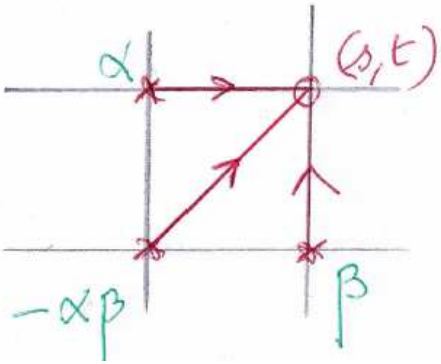
Isotropique aux 4 ppv

$$X_{st} = \alpha \left(\text{somme 4 ppv} \right) + \eta_{st}$$



Factorisant (causal) aux 3-ppv

$$X_{st} = \alpha X_{s-1,t} + \beta X_{s,t-1} - \alpha\beta X_{s-1,t-1} + \eta_{st}$$



Précautions sur un SAR

- Un *SAR bilatéral ≠> AR causal* (pour l'ordre lexicographique; cf. exemple dans le polycopié)
- *Sans contrainte*, un *SAR non identifiable*
- L'estimation des *MCO* est *non convergente*
- Avantage : *SAR* est *parcimonieux* en paramètres

AR conditionnel général (*CAR*) sur *S*

- Écrire l'espérance conditionnelle de *X(t)* sur autres *X* :
  Les résidus *e* sont corrélés entre eux, décorrélés des *X* :

$$X_t = \sum_{s \in S:\, s \neq t} c_{t,s} X_s + e_t, \qquad \forall t \in S$$

$$Var(e_t) = \sigma_t^2 > 0,\ Cov(X_t, e_s) = 0 \text{ si } t \neq s.$$

- *Notations* : *D* diagonale des résidus, ∑ = *Cov(X)*
  C paramètres CAR. On a l'identité :

$$\Sigma^{-1} = D^{-1}(I - C)$$

➔ *contraintes sur les paramètres du CAR*

Contraintes sur les paramètres d'un *CAR*

$$X_t = \sum_{s \in S:\, s \neq t} c_{t,s} X_s + e_t,$$

$$(I - C)\Sigma = D.$$

$$c_{t,s}\sigma_s^2 = c_{s,t}\sigma_t^2, \qquad \forall t \neq s \in S.$$

AR Conditionnelle (CAR) stationnaire

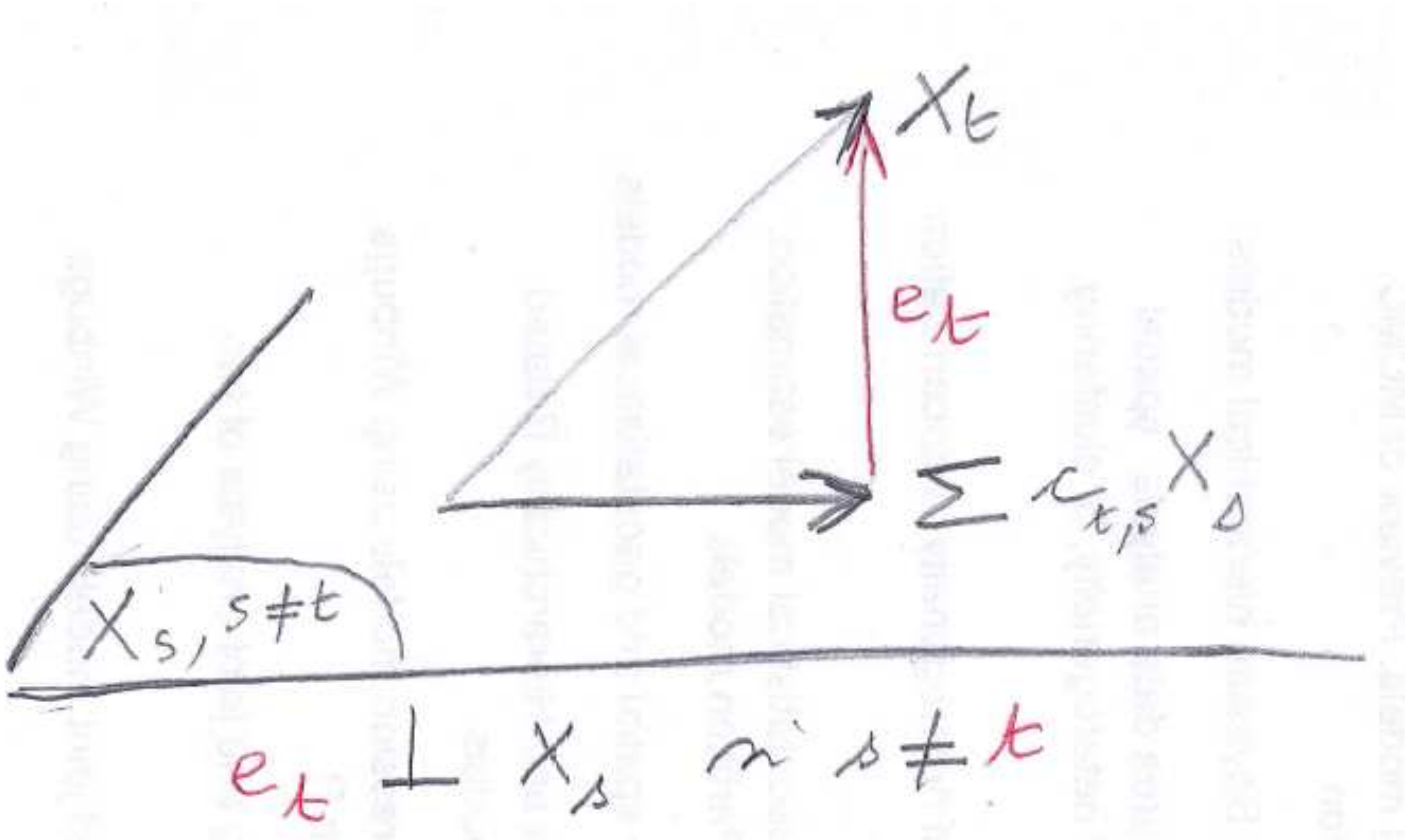
$$X_t = \sum_{s \in L} c_s X_{t-s} + e_t \ \ avec, \ si \ s \in L^+ : c_s = c_{-s}$$

$$\forall s \neq t : Cov(e_t, X_s) = 0 \ \ et \ E(e_t) = 0$$

- *L'espérance conditionnelle linéaire* de *X(s)* sur les autres *X(t)*
- *e(t)* est *décorrélé* des *X(s)* pour *s ≠ t*
- *Le graphe d'un CAR symétrique ainsi que les c*.
- Le résidu conditionnel *e* est un *bruit coloré* (c-à-d corrélé) :

$$Cov(e_t, e_{t+s}) = \begin{cases} \sigma_e^2 \ \ si \ s = 0, \\ -\sigma_e^2 c_s \ \ si \ s \in L \end{cases} \quad et \ Cov(e_t, e_{t+s}) = 0 \ \ sinon$$

CAR : espérance conditionnelle linéaire et résidu



SAR ou *CAR* : pour résumer

- Un *SAR* est spécifié par *n* équations simultanées à résidus *BB*

- Un *CAR* est spécifié par ses « espérances conditionnelles linéaires ». Le bruit résiduel est coloré

CAR ou *SAR* ?

- Tout *SAR* est un *CAR*
- Si *S fini*, *CAR* ≡ *SAR* *(≠ sinon)*
- Écriture CAR *intrinsèque*, celle d'un *SAR non*
- *Estimation MCO*

  d'un CAR convergente

  d'un SAR non
- *SAR* : plus *parcimonieux* en nombre de paramètres
- *CAR* : *contraintes sur les paramètres*

Correspondances des graphes : ***R*** *d'un* SAR ← et → ***G*** d'un CAR

- ***R*** graphe du SAR : *orienté*
- ***G*** du CAR : *non orienté*, le « double » de ***R*** :

Le graphe $\mathcal{G}$ de la représentation markovienne CAR de X est

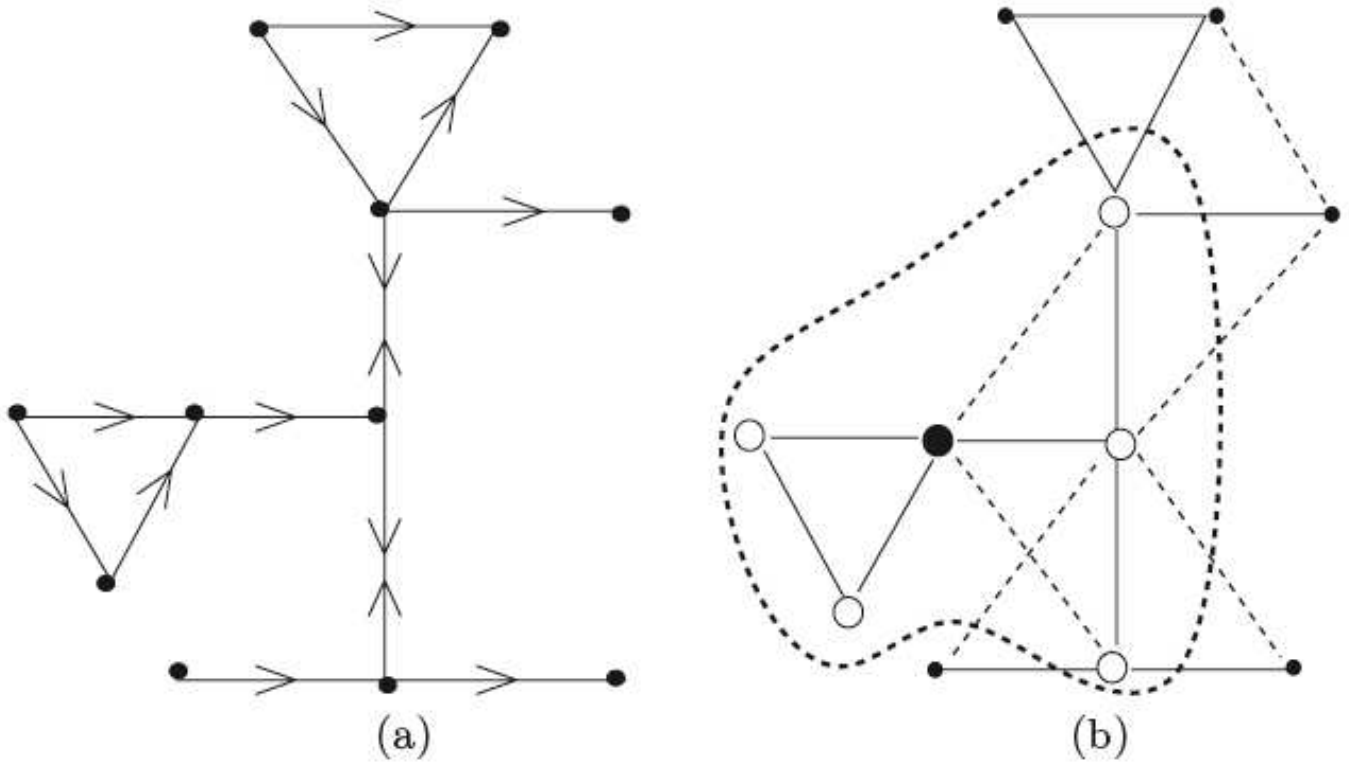
$$\langle t,s\rangle_{\mathcal{G}} \Longleftrightarrow \begin{cases} \text{soit } \langle t,s\rangle_{\mathcal{R}}, \\ \text{soit } \langle s,t\rangle_{\mathcal{R}} \\ \text{soit } \exists l \in S \text{ t.q. } \langle l,t\rangle_{\mathcal{R}} \text{ et } \langle l,s\rangle_{\mathcal{R}} \end{cases}$$

Exemple de correspondance

(a) SAR et *R*

(b) CAR associé et *G*

en pointillé : voisinage CAR de ●



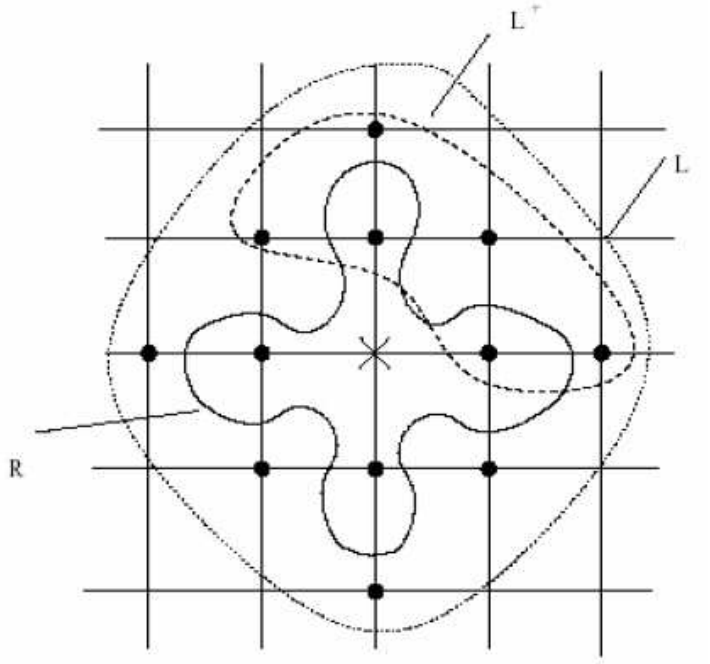
SAR aux 4 ppv et *CAR* associé

- *SAR* aux **4-ppv** avec *R = {(1,0),(-1,0),(0,1),(0,-1)}*

$$X_{s,t} = a(X_{s-1,t} + X_{s+1,t}) + b(X_{s,t-1} + X_{s,t+1}) + \varepsilon_{s,t}$$

→ *CAR* aux **12-ppv** (cf. poly. pour les coeff. *c(s)*) avec

L+ = {(1,0),(2,0),(1,1),(0,1),(0,2),(1,-1)}



avec un **gain de prédiction**

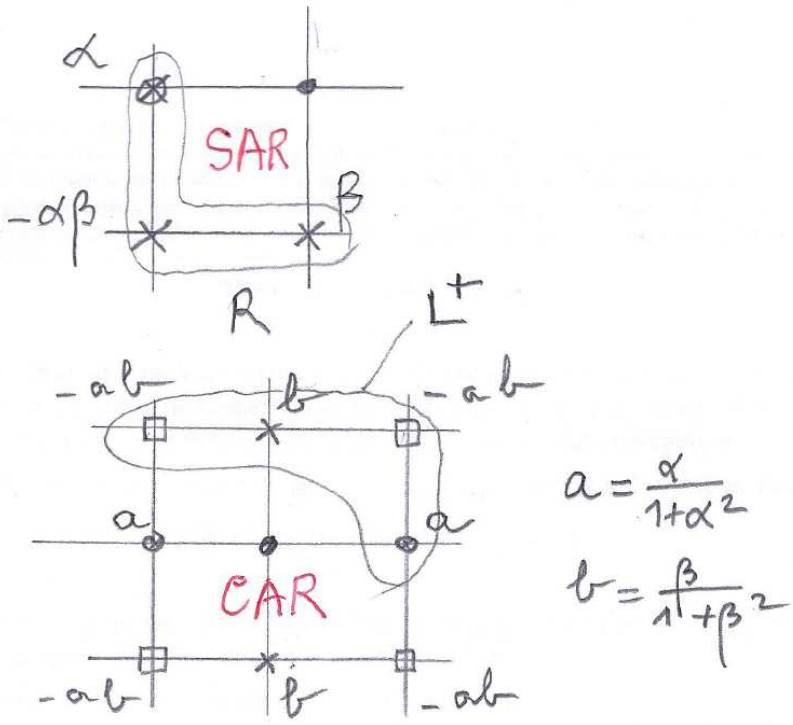
$$(1 + 2a^2 + 2b^2)^{-1}$$

*κ**2 =*

SAR factorisant aux 3 – ppv et CAR aux 8-ppv associé

R = support du *SAR* et *L* = support du *CAR* (8 voisins)

$$X_{s,t} = \alpha X_{s-1,t} + \beta X_{s,t-1} - \alpha\beta X_{s-1,t-1} + \varepsilon_{s,t}$$



$$\kappa^2 = (1+\alpha^2)^{-1}(1+\beta^2)^{-1}$$

SARX avec exogènes

- *X endogène*, *Z* matrice des *exogènes*
- Matrice de retard *W* sur endogène et exogène

- 3 types de variables expliquent *X(t)* :

  (1) endogène retardée WX,

  (2) exogène Z et

  (3) exogène retardée WZ.

- On obtient facilement *E(X)* et *Cov(X)*

$$X = \rho W X + Z\beta + WZ\gamma + \varepsilon,\ \rho \in \mathbb{R},\ \beta \text{ et } \gamma \in \mathbb{R}^p$$

Deux modèles avec exogènes

- Modèle de ***Durbin spatial*** (*X-Zβ ~ SAR(ρ,W)*)

$$(I - \rho W)X = (I - \rho W)Z\beta + \varepsilon$$

- Modèle à ***décalage spatial*** (*γ = 0*)

$$X = \rho W X + Z\beta + \varepsilon$$

Auto - corrélation de Moran

- *X* sur *S={1,2,…,n}* *centré* (adaptation si modèle de régression sur E(X))
- *W(i,j)* matrice de poids *i → j, i ≠ j* (*W(i,i)=0*) donnée
- *W* – ***auto-corrélation*** de Moran :

$$: \qquad I_M = \frac{n \sum_{i,j} w_{i,j}(X_i - \overline{X})(X_j - \overline{X})}{s_0 \times \sum_i (X_i - \overline{X})^2}$$

$$s_0 = \sum_{i,j} w_{i,j} = \text{ somme des poids } W$$

Test de non corrélation spatiale *(H(0))*

- *I(M)* petit de variance identifiée

$$\text{Sous } (H_0) \quad : \quad E(I_M) = o(1) \text{ et } Var(I_M) \simeq \frac{s_1}{s_0^2}$$

$$\text{où } s_1 \quad = \quad \sum_{i,j} (w_{i,j}^2 + w_{i,j} w_{j,i}).$$

- Si X gaussien, plus précisions sur E() et Var().

- En général, sous *(H0)*, normalité : $\frac{s_{0n}}{\sqrt{s_{1n}}} I_n^M \xrightarrow{loi} \mathcal{N}(0,1).$

Indice de Geary

Mesure la dépendance spatiale comme le fait un variogramme :

I(G) est petit si les valeurs voisines sont proches

$$I_n^G = \frac{(n-1)\sum_{i,j\in D_n} w_{ij}(X_i - X_j)^2}{2s_{0n}\sum_{i\in D_n}(X_i - \overline{X})^2}.$$

Loi permutationnelle d'une statistique *I(X)*

- *X={X(i),i=1,n}* et *I(X)* une statistique réelle
- Distribution empirique des *{I(X(σ)),* σ permutation*}*
- Intervalle de confiance associé à la statistique d'ordre
- Mais n! est trop grand → le faire pour *m* permutations choisies au hasard

$$\mathcal{I} = [I_{(\alpha\sigma)}, I_{((1-\alpha)\sigma}]$$

Application : test de permutation de *(H0)* : indépendance des *{X(i),i=1,n}*

- Choix de *I(X),* l'indice de Moran : sous *(H0),*

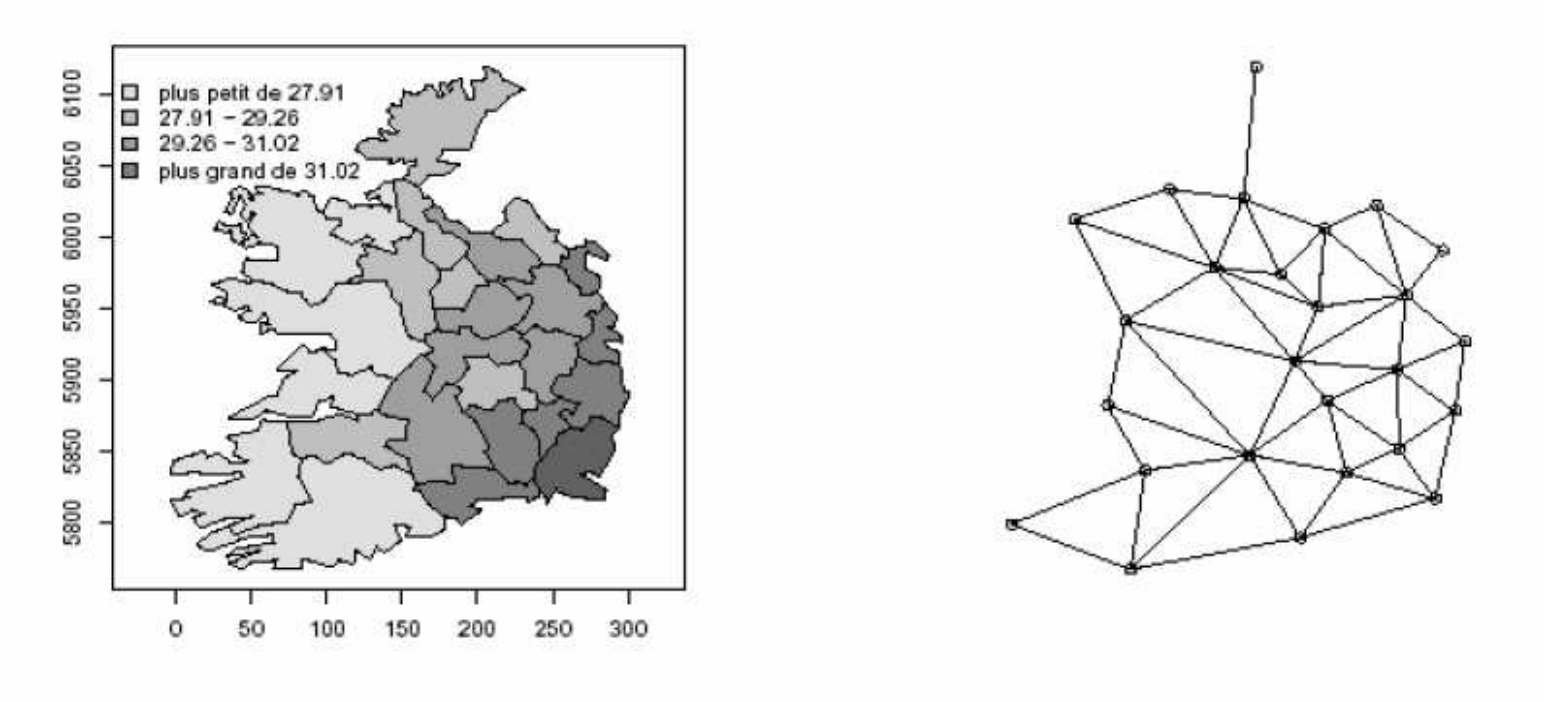
$$(X_i,\, i = 1, \ldots, n) \sim (X_{\sigma(i)},\, i = 1, \ldots, n).$$

- Calcul des *I(σ,X)* pour *m permutations* au hasard (i.e. *m=1000*) et de l'intervalle de confiance empirique *IC(1-α)*
- Calcul de *I(x)* pour l'observation ***x***
- Si *I(x)* n'est pas dans *IC(1-α),* rejet de *(H0)*

- **Avantage :** non – asymptotique, libre du modèle sur *X*
- **Inconvénient** : le niveau est approximatif

Données *eire* : groupe sanguin A

1 - *G* = graphe de voisinage de contiguité des 26 contés
2 - *w(i,j) = 1/*(nb voisins de i) si *j* est voisin de *i*



Indice de Moran (Geary) + indices réduits *t(a)* probabilités *p(a)* de dépassement

1 – *I =* index, *t(a)* index réduit, asymptotique gaussienne
2 – *p(a) =* proba de dépassement de *t(a)*
3 – *pmc(a)* pour le test de permutation MC (*m = 1000* permutations)

	Index	t^a	p^a	p^a_{MC}
Moran	0.554	4.663	0	0.001
Geary	0.380	-4.547	0	0.001

Le package `spdep` :
étude sur l'exemple des données `eire`

- Données i.e. : `eire` groupe sanguin en Irlande
- Tester bloc par bloc l'exemple de traitement de ces données

  1 - représentation des données (valeur, graphe de voisinage)

  2 - indice de Moran et test de non corrélation spatiale

  3 - régression sur `town` et `pale`, analyse des résidus (indice de Moran, SAR sur les résidus)
- Autres données sur la consommation intérieure

Quelques programmes de `spdep`

- `moran, moran.test` et `moran.mc`
- `lagsarlm :` estimation du MV d'un SAR avec covariables

  $$y = \rho W y + X \beta + e$$
- `knearneigh` : matrice des k-ppv pour un choix de distance
- `lm.morantest` : test de Moran pour l'auto-corrélation spatiale des résidus d'un modèle linéaire
- `lm.morantest.exact :` test exact de non corrélation
- `sp.correlogram` : corrélogramme spatial pour l'indice de moran

  et d'autres programmes ….

Estimation d'une régression spatiale

$$X = Z\delta + \varepsilon \text{ où } Cov(\varepsilon) = \Sigma$$

- Estimation MCO de δ : $\widetilde{\delta} = ({}^tZZ)^{-1}\ {}^tZX.$

- Sous bonnes conditions, consistance des MCO

  → MCO bonne estimation initiale dans une procédure itérative type MCQG

Moindres Carrés Généralisés (MCG)

- Si ***Σ = cov (ε)*** est connue, le BLUE vaut

$$\hat{\delta}_{MCG} = ({}^tZ\Sigma^{-1}Z)^{-1}{}^tZ\Sigma^{-1}X;$$

$$Var(\hat{\delta}_{MCG}) = ({}^tZ\Sigma^{-1}Z)^{-1}.$$

- Si ***X*** gaussien, c'est l'EMV, efficace

- En général ***Σ*** inconnue → MC Quasi G (MCQG)

MCQG : $\Sigma = \Sigma(\theta)$, θ inconnu

1. estimer δ par MCO : $\tilde{\delta} = ({}^tZZ)^{-1}{}^tZX$.

2. calculer les résidus des MCO : $\tilde{\varepsilon} = X - Z\tilde{\delta}$

3. sur la base de $\tilde{\varepsilon}$, estimer $\tilde{\theta}$ (pour $\Sigma(\theta)$ ou $2\gamma(\theta)$) par MC.

4. estimer Σ par $\tilde{\Sigma} = \Sigma(\tilde{\theta})$ puis δ par $MCG(\tilde{\Sigma})$. Itérer.

Régression Gaussienne : MV

- Régression à covariance non sphérique :

$$X \sim \mathcal{N}_n(Z\delta, \Sigma(\theta))$$

- Mardia-Marshall donnent le comportement limite de l'EMV de *(θ,∂)* (cf. poly)

- Log-vraisemblance est explicite :

$$2l(\delta,\theta) = \log|\Sigma(\theta)| + {}^t(X - Z\delta)\Sigma^{-1}(\theta)(X - Z\delta)$$

Données `eire` : 2 modèles de régression avec 2 covariables

- towns (densité urbaine) et
- pale (binaire, 1 si colonisation anglaise, 0 sinon)

(R1) : cste, towns et pale + **résidus i.i.d.**

(R2) : cste, pale + **résidus SAR** aux ppv : $r = (\rho\, W)\, r + e$

	Modèles	
Coefficient	(a)	(b)
Intercept	27.573 (0.545)	28.232 (1.066)
towns	-0.360 (2.967)	-
pale	4.342 (1.085)	2.434 (0.764)
ρ	-	0.684 (0.148)

Spdep, le package de *R* pour les SAR, SARX, Indice de Moran, test Monte Carlo, …

- ***spdep*** : spatial dependence, weighting schemes, statistics, models.

anova.sarlm : compare des SAR

deviance.sarlm

errorsarlm : MV du modèle de Durbin spatial, $Y=Xb+u$ ou $u=rWu+e$

Données : ***sids***, ***eire, getisord*** (télédétection)

moran, moran.mc (test de permutation), ***moran.test*** (gaussien)

plot.spcor : corrélogramme spatial,

etc…….

- **Autres packages :**
- ***nlme*** **:** linear and non linear (mixed effect) models

gls **(**et ***gnls)*** : GLS pour modèle linéaire (non linéaire), avec ou sans effet aléatoire.

logLik.g(n)ls : MV pour ces modèles

- ***RandomFields*** : simulation et analyse des RF.

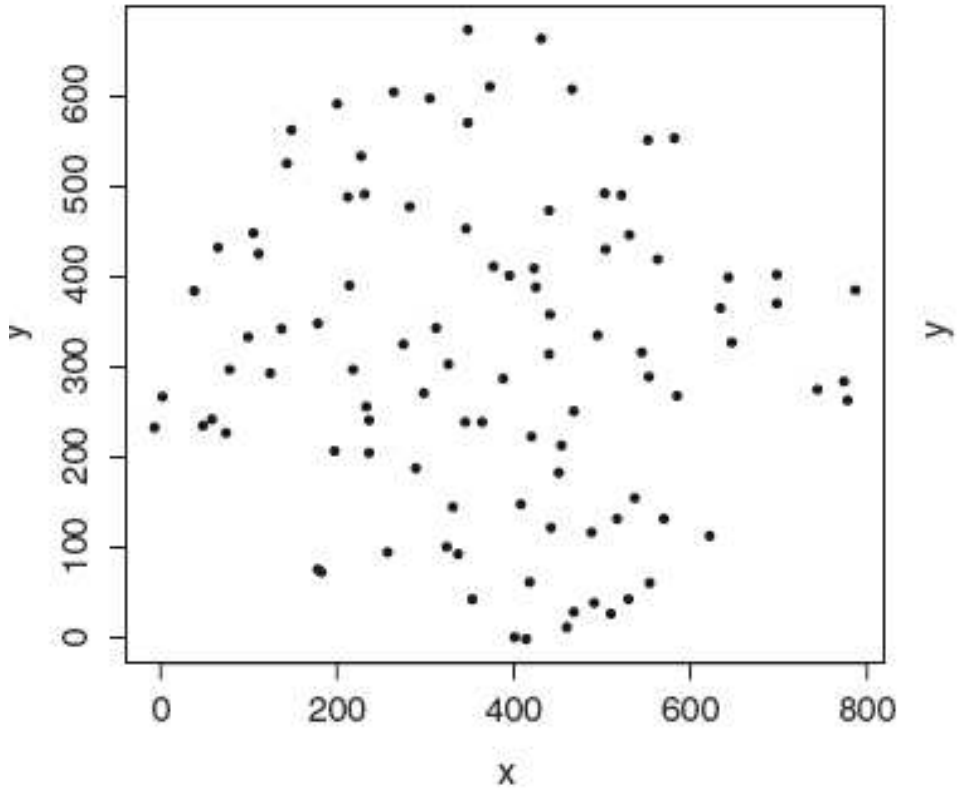
Processus Ponctuels Spatiaux

- Ici, c'est la **répartition spatiale des points** où ont lieu les observations qui **est aléatoire**.
- Hypothèse de base a tester : la répartition est homogène et au hasard (CSR pour ***Complete Spatial Randomness***), celle d'un ***PP de Poisson***.
- D'autres répartitions sont plus régulières (noyau dur), d'autres moins (agrégats).

Répartition de 97 fourmilières

(données *ants* du package *spatstat*)

Question : *la répartition s'est elle faite au hasard ?*



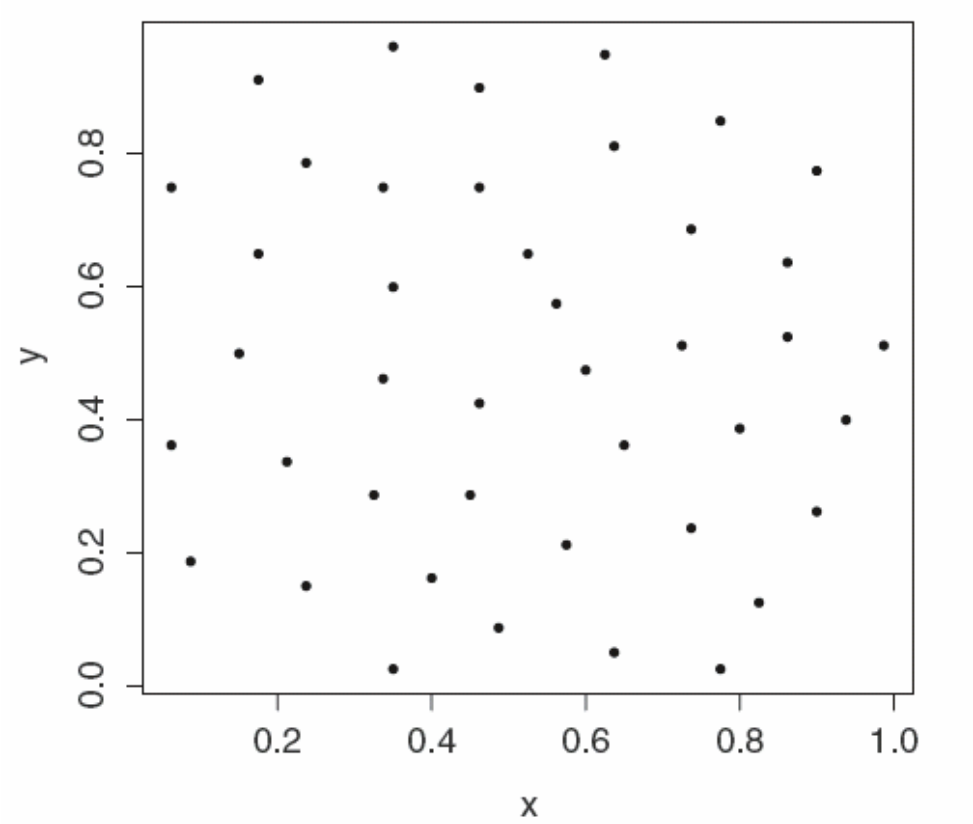
(a)

42 centres de cellules d'une coupe histologique

(données *cells* de *spatstat*)

1 - La répartition est – elle au hasard ?

2 - Sinon (+ de régularité), quel modèle proposer ?

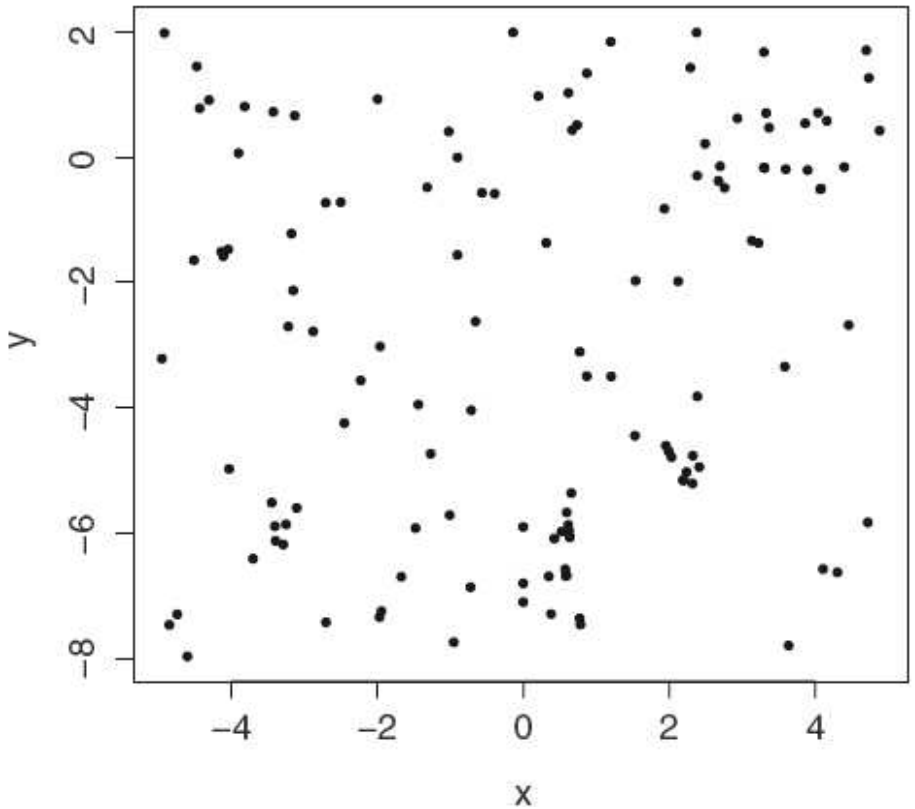


126 pins d'une forêt finlandaise

(données *finpines* de *spatstat*)

1 - La répartition est elle au hasard ?

2 - Sinon (des agglomérats ?), quel modèle proposer ?



Modèle de Processus Ponctuel *X* (PP)

- *Configuration* ***x*** : ensemble fini de points de la fenêtre d'observation *S*
- *Configuration à n points* : ***x*** *= {x(1),x(2),…,x(n)}*

- *E(n) =* espace des configurations à *n* points
- *E = U E(n)* : *l'espace exponentiel* de toutes les configurations, réunion des *E(n)*

- *N(A)* : le nombre de points de ***X*** dans *A*
- *Loi de* ***X*** : loi jointe de toutes les variables de comptage *N(A), A* partie de *S*

PP de Poisson homogène d'intensité λ

PPP(λ) : **répartition spatiale *homogène et au hasard***

(1) N(A) suit une loi de Poisson de paramètre *λ IAI*

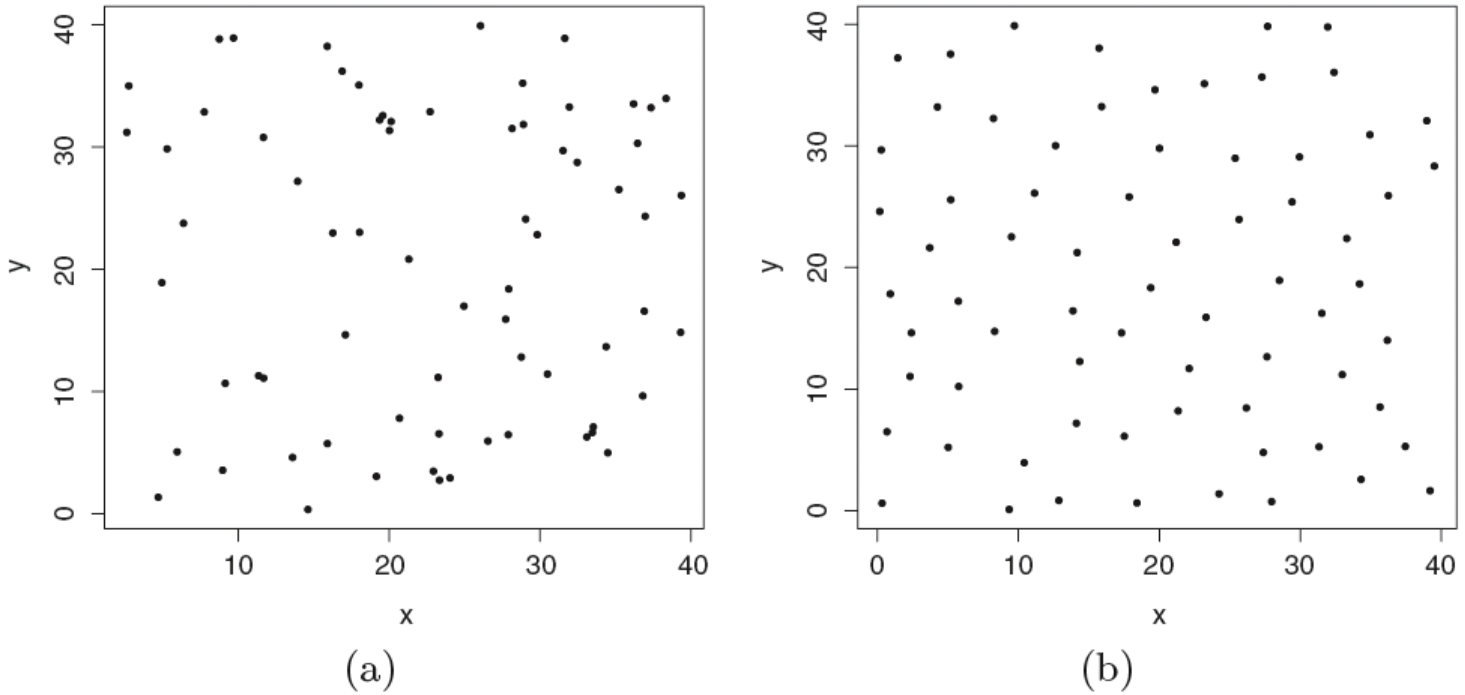
(2) La répartition sur *A* est uniforme

(1-2) ≡ (1-2*) où

(2*) : si *A* et *B* sont disjoints, *N(A) et N(B)* sont indépendants

Deux répartitions spatiales homogènes à 70 points

- (a) une répartition de *Poisson* homogène
- (b) une répartition « *à r - noyau dur*» homogène (couples de points à distance < *r = 3.5* sont interdits)



PPP inhomogène d'intensité $\lambda(\bullet)$

Soit $\lambda(\bullet)$ une *mesure* sur la fenêtre d'observation S

X est un $PPP(\lambda(\bullet))$ si :

(1) $N(A)$ suit une loi de Poisson de paramètre $\lambda(A)$

(2) si A et B sont disjoints, $N(A)$ *et* $N(B)$ sont indépendants

Simulation d'un *PPP(λ(●))*

Supposons que pour tout x : $\lambda(x) \leq c < \infty$

La méthode par ***effacement de points*** est la méthode de simulationpar rejet suivante :

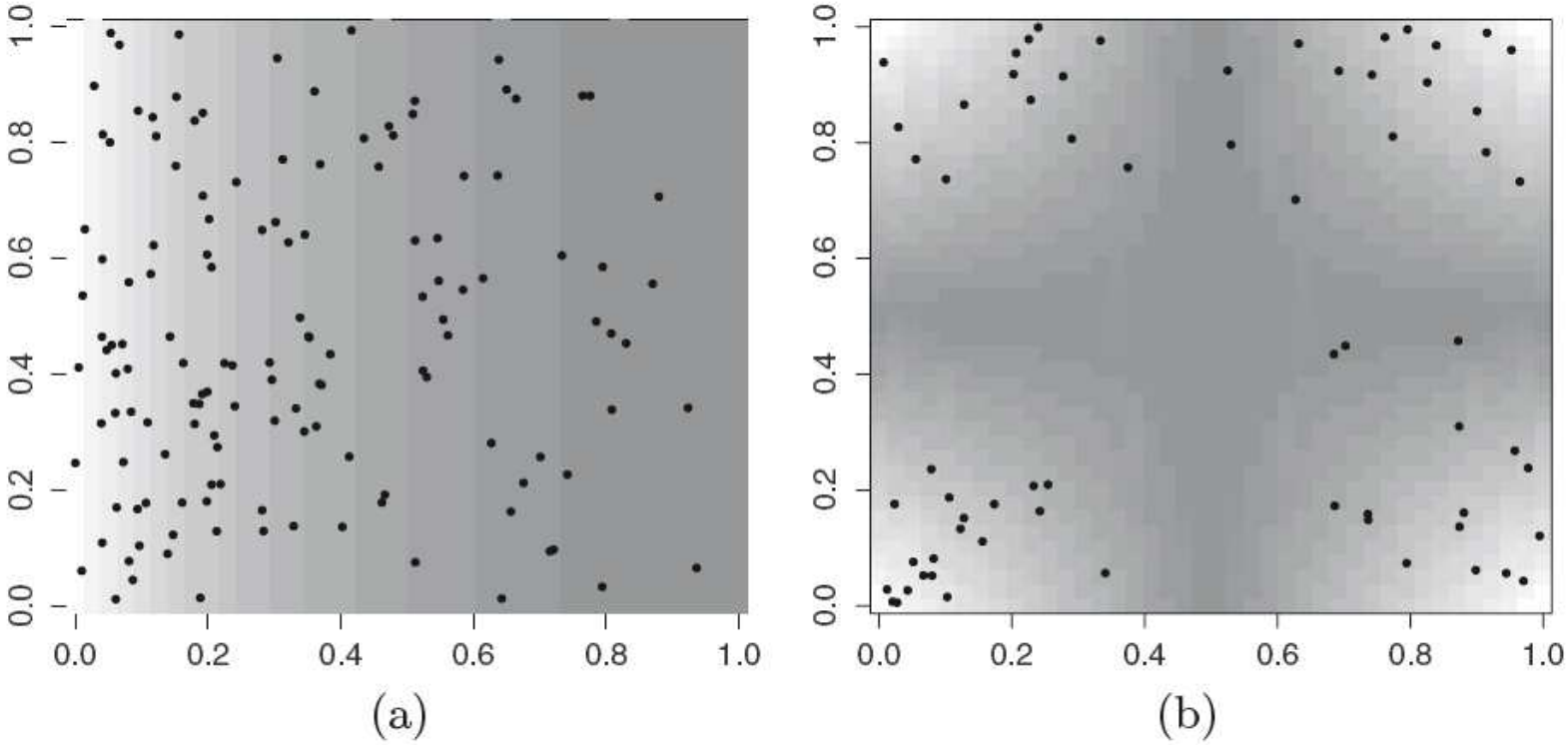
1. Simuler ***x**** , un PPP homogène d'intensité c;
2. Effacer indépendamment un $x(i)$ de ***x**** avec la probabilité $p(x(i)) = \{1- \lambda(x(i))/c\}$.

Simulation de 2 PPP inhomogènes

(λ plus grand → fond plus clair)

Deux intensités inhomogènes

(a) : $\lambda(x, y) = 400\ e^{-3x}$ et (b) $\lambda(x, y) = 800 \times |0.5 - x| \times |0.5 - y|$



Répartition plus régulière : modèle à noyau dur (ou hardcore)

La règle : *interdire les points trop proches*

- **Exemples :**
  - répartition spatiale d'animaux (compétition)
  - boulangeries dans une ville
  - centres de cellules
  - arbres dans une forêt (??)
  - en physique, centres d'«atomes impénétrables»
- Ces modèles vont être défini par leur *densité de Gibbs*

Répartition moins régulière : formation d'agrégats (clusters)

Exemple : le PP de Neymann – Scott

1. Un processus ***P*** « parent » : *PPP* homogène *λ*
2. Chaque parents *P(i)* engendre des enfants en *nombre N* et en *positions* D centrées autour de *P(i)*, *aléatoires*, *N* et *D* indépendantes

   Paramètres : *λ*, les lois *N* et *D*

Simulation de PP spatiaux avec `statspat`

- `owin :` crée la fenêtre d'observation (si nécessaire)
- `runifpoint` : n points uniformes.
- `runifpoint3` : idem mais dans R**3 (installer le package `scatterplot3d` pour la représentation 3d).

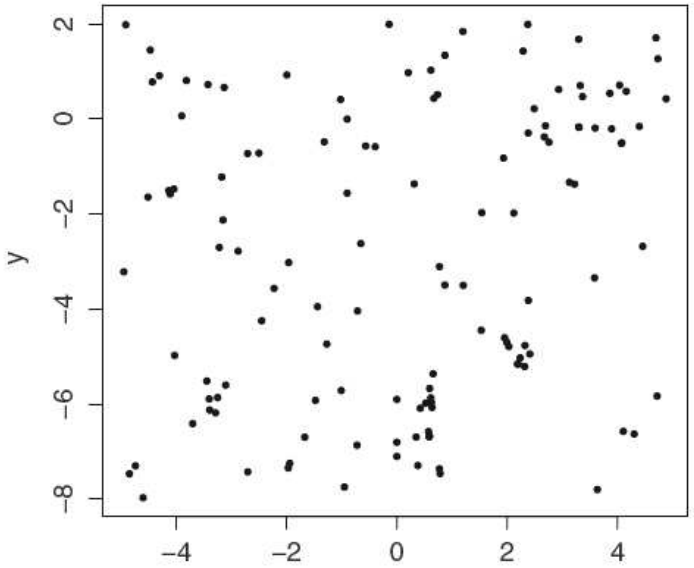
```
> X = runifpoint3(5000)
> plot(X)
```

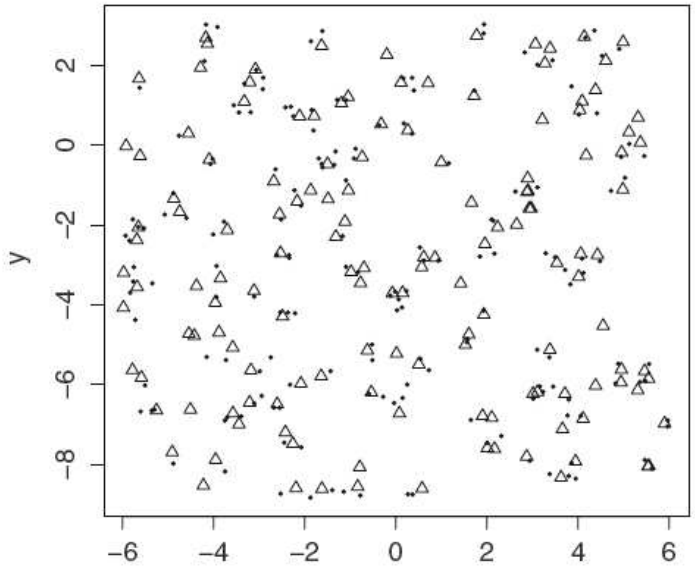
- `rpoispp` : simulation d'un PPP (homogène ou non)
- `rNeymanScott` : PP de N-S avec agrégat
- `rThomas` ….

- `rmh` : simulation d'un PP à partir de son modèle de densité (Strauss, noyau dur, etc)

Ajustement *finpines* sur un Neymann – Scott

- **(a) *Données réelles :*** modèle de NS à 3 paramètres $\theta = (\lambda,\mu,\sigma^{**}2)$
  1 - *parents Poisson* λ
  2 - *nombre de descendants* d'un père *Poisson* μ
  3 - *répartition des fils* autour d'un père *Gaussienne sphérique* $\sigma^{**}2$
  → Ajustement par MCO (cf. poly) puis
- **(b) *Simulation* du NS estimé** (Δ parents et ● descendants)





PP doublement Poissonien

- PPP à intensité *aléatoire {Λ(s), s* dans *S}*
- **Exemple : PP de Cox log-gaussien *X***

  - *Λ* suit le modèle *log-linéaire à effet aléatoire*

$$\log \Lambda(\xi) = {}^t z(\xi)\beta + \Psi(\xi)$$

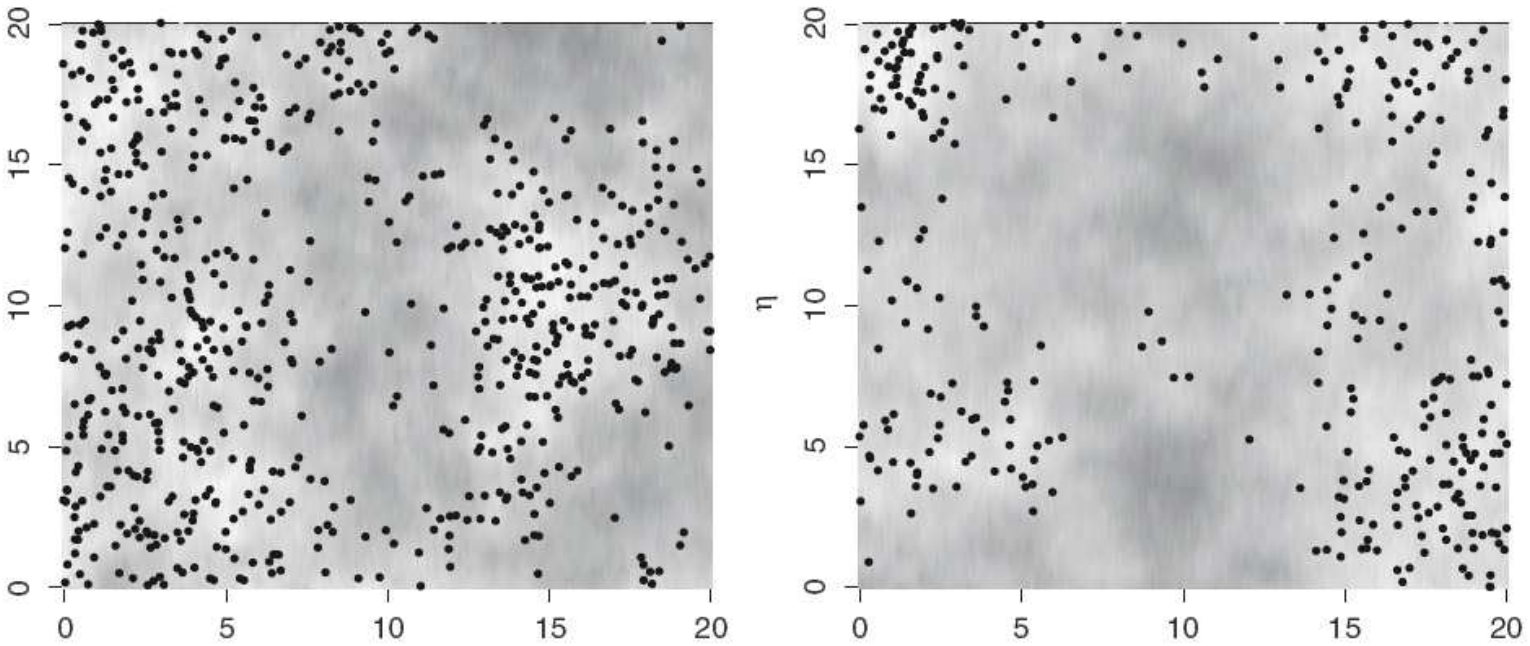
  - *ψ* un champ Gaussien centré de covariance *c*
  - *c* contrôle la corrélation spatiale de ***X***

(Moller – Waagepertersen)

Deux exemples de PP de Cox

- intensité Λ en fond grisé ($\Lambda(s)$ grand, fond clair)
- Modèle log-Linéaire : $\beta = z \equiv 1$ partout
- Deux covariances c pour l'intensité aléatoire Λ

$$\text{(a) } c(\xi,\eta) = 3\exp\{-\|\xi-\eta\|/10\}\,;\ \text{(b) } c(\xi,\eta) = 3\exp\{-\|\xi-\eta\|^2/10\}.$$



PP marqué (PPM)

- Une marque *m(x(i))* s'ajoute en chaque *x(i)* de ***X***
- **Exemples** :

  - marque « *disque* » centré en *x(i)* (diamètre arbre)

  - rayon *r* du disque est fixé ou aléatoire *R*

  - marques *fibres* curvilignes attachées à *x(i)* (système racinaire d'une plante, segment de longueur et orientation aléatoires)

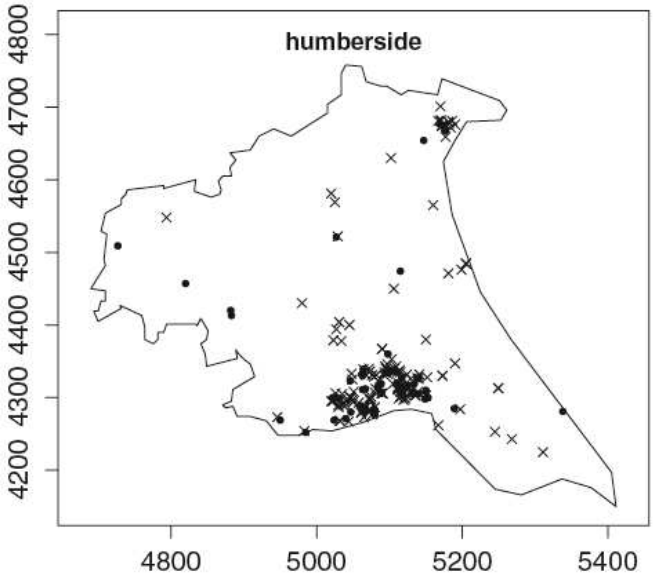
  - nombre fini *K* de marques : *K* états possibles, une couleur est associée à chaque *x(i)* (i.e. *K=2* deux états « sain » ou « malade »)

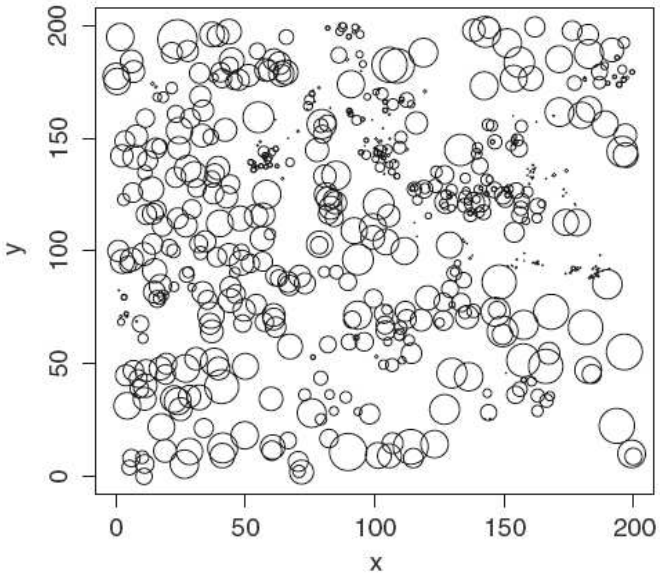
Deux exemples de PPM

(a) **Marques binaires** : localisation des 62 cas (●) de *Leucémie* d'un canton et de 141 résidences (x) d'enfants sains (*K=2*, données *humberside*)

(b) **Marques continues** : positions et tailles des 584 aiguilles de pin d'un sous bois (données *longleaf*)

Question sur (a) : effet spatial influençant la maladie ?





Densité *f* d'un PP

- ***f*** : densité de probabilité par rapport à un *PPP(1)*
- ***f*** *: E →* *R,* *E =* espace exponentiel de toute les configurations ***x***
- ***f*** admissible si intégrable, d'intégrale *1*

- En général on définit ***f*** à une constante près :
  f*(x) = c g(x)* où *g* explicite (mais pas *c*!)

- Inutile connaître *c* pour la simulation (Metropolis)
- Mais il faut connaître *c = c(θ)* pour l'estimation du MV de *θ*

Exemple de PP à densité : PP de Gibbs

- $U(x)$ ← potentiel de Gibbs : $U(x) = \Sigma\, \Phi(A)(x)$
- Admissibilité de $exp\ \{U(x)\}$

- **Exemple** : famille exponentielle

$$\boldsymbol{f}(x)=c(\theta)\ exp\ \{ < \theta\ ,\ T(x) > \}$$

PP de Strauss

- *U(x)* dérive de 2 statistiques issues de *x* :
  1 - n(x) = nombre de points de *x*
  2 - s(x) = nombre de couples de *x* à distances < *r*

- **Energie :** *U(x) = a n(x) + b s(x)* (ou *a = log β* et *b = log γ*)

$$f_\theta(x) = c(\theta)\beta^{n(x)}\gamma^{s(x)}, \qquad \theta = {}^t(\beta, \gamma).$$

β (ou *a*) règle l'intensité de *x; γ* règle la régularité spatiale :
- *γ < 1 :* d'autant plus régulière que *γ* petit
- *γ = 1 : PP* de *Poisson* homogène d'intensité *b=log(γ)*
- *γ > 1 :* formation d'agrégats

- *PP* à ***noyau dur*** : *γ = 0,* interdit les couples à distance < *r*

Simulation Metropolis d'un PP de Gibbs

On circule dans les espaces *E(n)* en autorisant à une itération :

→ soit une naissance (proba ½)

→ soit une mort (proba ½)

suivant la règle suivante :

$$f_\theta(x) = c(\theta)\beta^{n(x)}\gamma^{s(x)}, \qquad r(x, x \cup \xi) = \frac{\nu(S) f(x \cup \xi)}{n(x) f(x)}.$$

- **Naissance** ξ retenue avec la proba $\inf\{1, r(x, x \cup \xi\}$;
- sinon rester en x.
- **Mort** η retenue avec la probabilité $\inf\{1, r(x \backslash \eta, x)^{-1}\}$;
- sinon rester en x.

Cet algorithme simule le PP de densité f.

Quelques outils statistiques

- **Moments d'ordre 1** ou intensité
  (modèle sur la moyenne)

- Moments d'ordre 2, corrélation repondérée
  (indépendance spatiale ou non)

- **Moment réduit** *K* d'ordre 2 de Ripley

- **Distances aux plus proches voisins**

Moments (intensités) d'ordre 1 et 2 d'un PP

Moment d'ordre 1

si B borélien borné : $\lambda(B) = E(N(B))$

Intensité ρ d'ordre 1 : $\lambda(dx) = \rho(x)dx$

Intensité d'ordre 2

$$\rho_2(x,y) = \frac{P(N(dx)=1 \text{ et } N(dy)=1)}{dx\ dy}$$

Corrélation de paires repondérée

$$g(x,y) = 1 + \frac{Cov(N(dx),N(dy))}{\rho(x)\rho(y)\ dx\ dy}$$

1. $g(\xi,\eta) = 1$ si les points apparaissent indépendamment
2. $g(\xi,\eta) > 1$ traduit une attraction entre les points (c positive).
3. $g(\xi,\eta) < 1$ traduit une répulsion entre les points (c

Moment K de Ripley (cas isotropique)

Soit X un PP isotropique de densité ρ.
Soit $B(x,h)$ la boule de centre x et de rayon h.
Soit x *un point de la réalisation* X. Alors :

$$\rho \times K(h) = E(\text{nb points } X \text{ dans } B(x,h))$$

K est liée à ρ_2 : si $d=2$, $\rho^2(h)K(h) = 2\pi \int_0^h u\rho_2(u)du$

K et régularité spatiale ?

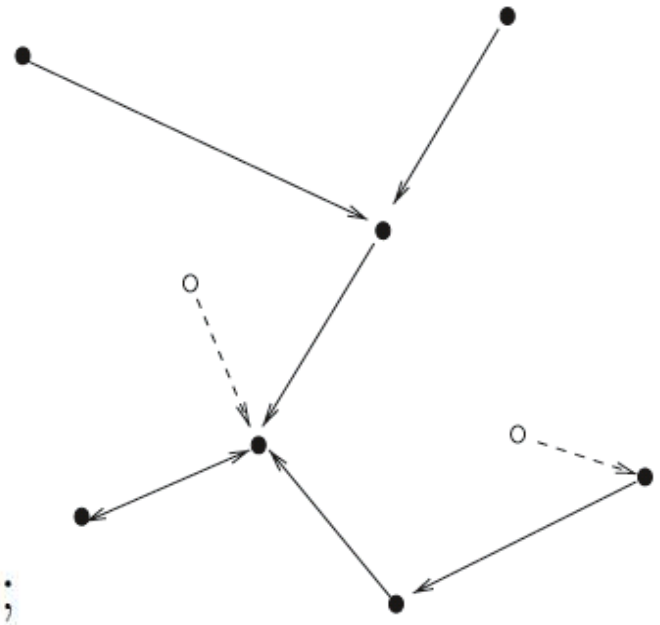
Soit X un PP de densité fixé sur $\mathbb{R}^2$

et la fonctionnelle $L(h) = \sqrt{\frac{K(h)}{\pi}}$. On a :

$$h \mapsto L(h) \text{ est } \begin{cases} \equiv h \text{ si } X \text{ est un PP de Poisson} \\ \textit{convexe} \text{ si } X \text{ est plus régulier (noyau dur)} \\ \textit{concave} \text{ si } X \text{ présente des aggrégats (NS)} \end{cases}$$

Distances aux plus proche voisins (ppv)

1 - d'un point ● de *X*
2 – d'un point o de la fenêtre d'observation



Deux distributions de distance au ppv :

1 - d'un point $x = \bullet$ de X :

$G_x(r) = G(r) = P(d(x, X\backslash\{x\}) \leq r);$

2 - d'un point $x = \circ$ de S $(x \notin X)$:

$F(r) = P(d(x, X\backslash\{x\}) \leq r).$

Distances aux ppv et régularité spatiale ?

Soit la fonctionnelle associée aux 2 distances :

$$J(r) = \frac{1 - G(r)}{1 - F(r)}$$

Si X est stationnaire :

$$\text{Alors si } J \begin{cases} = 1, X \text{ est un PP de } \textit{Poisson} \\ < 1 \text{ indique } \textit{plus de régularité} \text{ (noyau dur)} \\ > 1 \text{ indique } \textit{moins de régularité} \text{ (NS)} \end{cases}$$

$r \mapsto J(r)$ bonne statistique pour évaluer la dépendance spatiale

Questions de base pour un PP

- La répartition spatiale ***X*** est-elle due uniquement au hasard ? (*CSR = Complete Spatial Randomness*) ou non ?
- Si non, y a t'il compétition ? coopération ?
- Quel modèle de PP spatial proposer pour ***X*** ?
- Comment estimer le modèle ? Comment le valider ?
  → Méthodes paramétriques
  → ou méthodes de Monte Carlo

Test de « CSR » : *X* est un PPP

Utilisation des distances aux PPV et fonctionnelle *J*
Estimation de *J* ← estimations empiriques de *G* et *F*

Indicateur de régularité spatiale : $J(r) = \frac{1-G(r)}{1-F(r)}$,

$\Rightarrow$

Valeur de J	$J < 1$	$J = 1$	$J > 1$
répartition	+ régulière	au hasard (PPP)	- régulière

$X \sim PPP(\lambda)$ homogène sur $\mathbb{R}^2$: $G(r) = F(r) = 1 - \exp\{-\lambda\pi r^2\}$.

Test de « CSR » : utilisation de K

Autre indicateur : $L(h) = \sqrt{\frac{K(h)}{\pi}}$

$\Rightarrow$

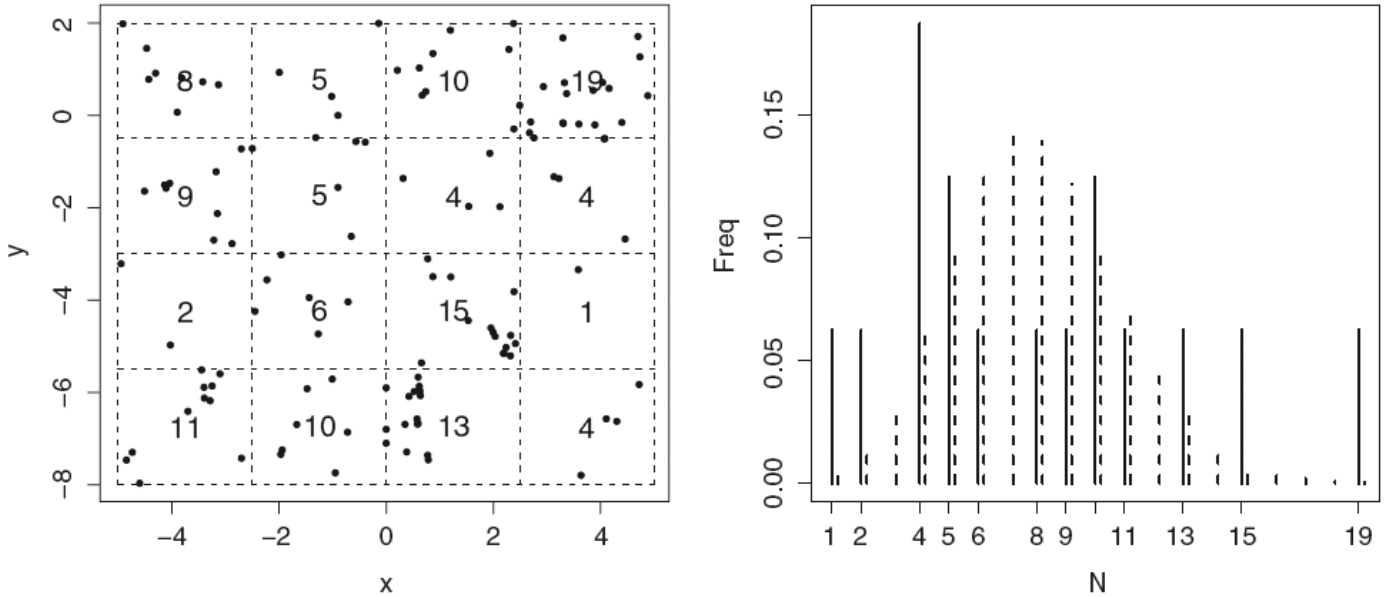
Type de L	convexe	linéaire	concave
répartition	+ régulière	au hasard (PPP)	- régulière

L'étimation de L découle naturellement de celle de K.

Test de « CSR » : comptages par quadrats

Chi 2 d'ajustement sur une loi de Poisson (*finpines*)

- On forme (par exemple) 4 x 4 = 16 quadrats même surface
- Comptage des effectifs *N(i)* pour chaque quadrat *i*
- Distribution empirique des *N(i)* (à droite)
- Distance à une distribution de Poisson : D = 46.7 >> $\chi^2(15;5\%)$



Estimation de l'intensité du PP

- **Méthodes non paramétriques classiques** : fenêtrage et noyau de convolution

- **Modèle paramétrique** : définir le modèle et estimer

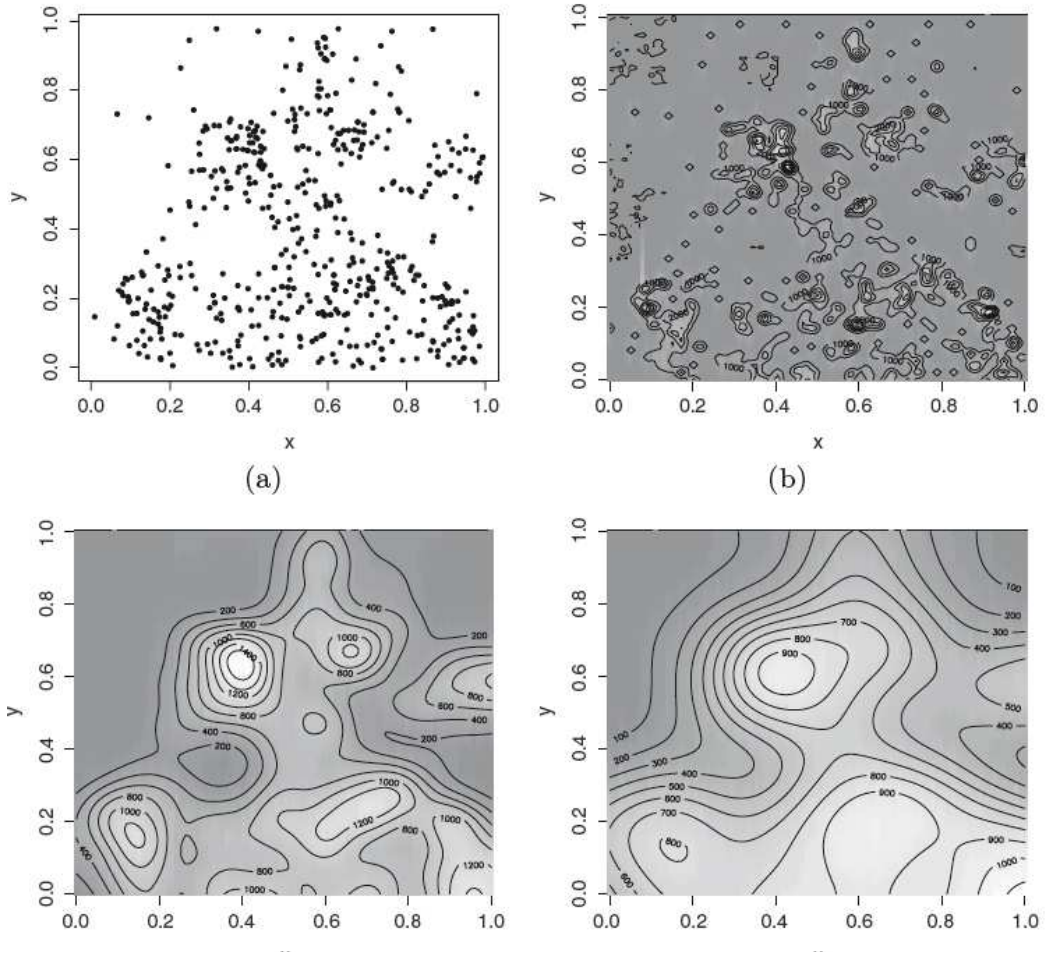
  → par MV en supposant CSR (c'est une PV si CSR non vérifiée)

  → bonne propriétés asymptotiques si X est ergodique

Estimation NP d'une densité d'un PP

(a) données érables (*lansing*) et

3 estimations (b-c-d) avec noyaux de + en + régularisant



Estimations NP des distances aux ppv et *K*

1 – *à partir de statistiques empiriques de comptage*

2 -- *lissage postérieur éventuel*

Moment K de Ripley : sur le disque *B* centré en *0* de rayon *h* si *X* est de densité *τ* :

$$\tau^2 \widehat{\mathcal{K}}(B) = \frac{1}{\nu(A)} \sum_{\xi,\eta \in X \cap A}^{\neq} 1_B(\xi - \eta)$$

Distribution G aux ppv : *x* un point de ***X*****,** *h(i)* les *n* distances *d(x,x(i))* pour les n points de ***X*** :

$$\widehat{G}(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} 1_{(0,h_i]}(h)$$

Estimation d'un modèle d'intensité $\rho(\bullet,\theta)$

- Si ***X*** est *PPP* d'intensité $\rho(\bullet,\theta)$, la log-vraisemblance de $\{x(1),x(2),\ldots,x(n)\}$ sur A est donnée ci-dessous
  si $\rho(\bullet,\theta)$ suit un MLG, maximisation via un logiciel dédié

- Si ***X*** est *PP* de densité $\rho(\bullet)$, on maximise encore cette Pseudo-Vraisemblance
  Bonne propriété limite si X ergodique et $A \rightarrow R^{**}2$.

$$l_A(\theta) = \sum_{\xi \in x \cap A} \log \rho(\xi;\theta) + \int_A \{1 - \rho(\eta;\theta)\} d\eta.$$

Moindres carrés pour un modèle *K(. ,θ)*

1 – choix d'une famille *H* de distances identifiant *θ* → *K(. ,θ)*

2 – MCO sur une puissance *c* de *K*

Choix (Diggle) : *c= 0.5* si *X* régulier, *0.25* si *X* avec agrégats

$$D^*(\theta) = \sum_{i=1,k} w_i \{\hat{K}(h_i)^c - K(h_i;\theta)^c\}^2;$$

k distances $\mathcal{H} = \{h_1, h_2, \cdots, h_k\}.$

Autres méthodes paramétriques

1 - Pour un PP, on sait définir une densité conditionnelle comme pour un champ de Markov sur un réseau (Jensen-Moller) → PVC pour un PP

2 - On maximise cette PVC : sous conditions d'ergodicité et de faible dépendance, « bons résultats asymptotiques

3 - Estimation par MV : la difficulté est le calcul de la constante de normalisation → l'approcher par Monte Carlo

Estimation d'un PP avec `spatstat`

Déclarer le modèle paramétrique : `Poisson, Strauss, Hardcore, StraussHard, Geyer, N-S, Thomas` ….

- `ppm` : ajuste le modèle aux données via la pseudo vraisemblance conditionnelle (si PPP, c'est la vraisemblance); consulter les exemples, i.e :

  `> data(nztrees)` puis `> plot(nztrees)`

  ```
  > ppm(nztrees,~ x,Strauss(13),correction="periodic")
  ```

- `rmh :` simule le modèle estimé → procédure « visuelle » de validation.

Estimation d'un PP avec `spatstat` (suite)

- `fitin` : donne l'interaction (0 pour un PPP) du PP estimé
- `lgcp.estK` : ajuste un PP de Cox log-gaussien à covariance exponentielle par MC sur la base de la statistique K
- `thomas.estK` : idem pour un PP de Thomas
- `log.link` : donne la log-vraisemblance de l'ajustement pour un PPP; on en déduit le critère AIC.
- `density` : lissage de densité par convolution (noyau k à choisir)

Estimation d'un PP avec `spatstat:` statistique et bande de confiance `G, J et K`

- `Gest` : estimation de la densité cumulée de la distance d'un point de la configuration X à son ppv dans X
  (F si distance d'un point courrant à son ppv dans X)
- `Jest : J(r) = (1- G(r)) / (1 – F(r)).`
  `J >1, =1 et <1` indique plus régulier, Poisson, moins régulier

- `Kest` : estime le moment d'ordre 2 K de Ripley.
- `Kinhom` : pour un PP inhomogène
- `envelope` : calcule les bandes de confiances par simulation des statistiques de base (`K, G, J` …)

- `Quadrat.test` : test du chi2 de l'hypothèse CSR d'indépendance spatiale.

Test de Monte Carlo de H(0) : « *X* est CSR »

Test basé sur un intervalle de confiance sur K

On observe ***x****.* Choisir *L* distances *{h(1),h(2),h(L)}.*

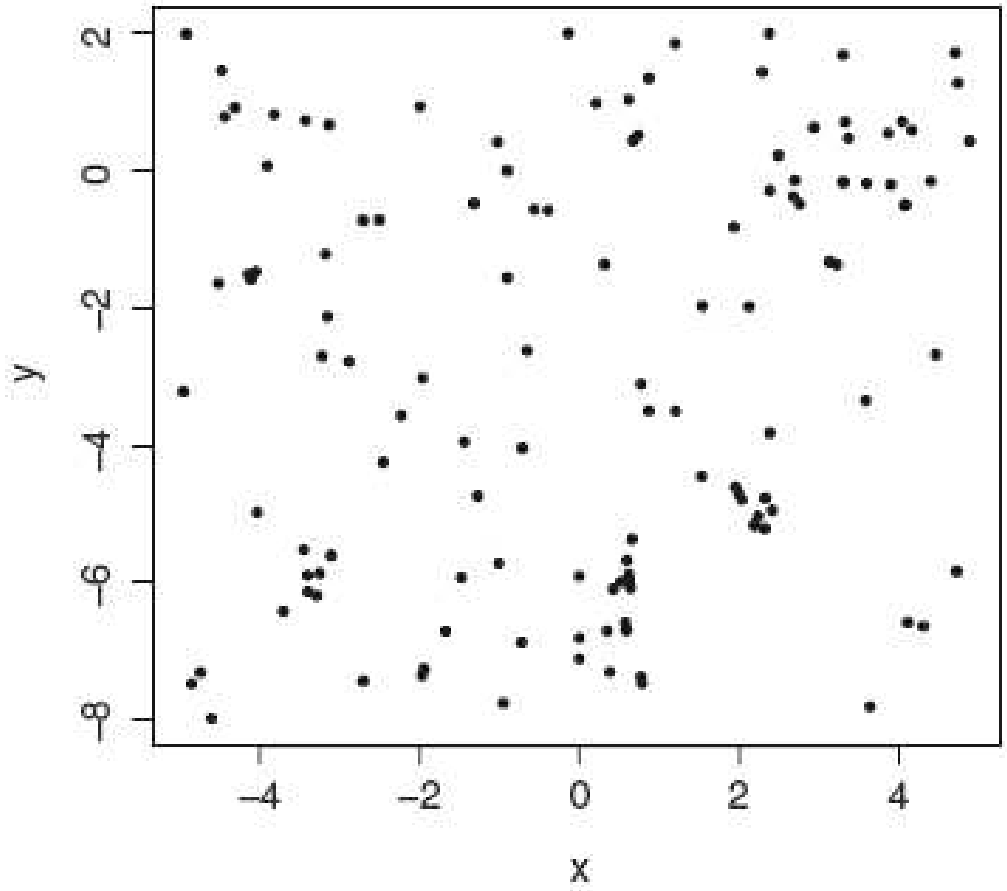
- Estimer (empiriquement) *K* par *K*(h(l))* à ces *L* distances
- Sous H(0), estimation *ρ** de l'intensité *ρ d'un PPP*
- Simulation de *m* réalisations *x*(l), l=1,m,* d'un *PPP(ρ*)* (i.e. *m=20*)
- → *m* estimations *K*(i,h(l))* associées à chaque *x*(i)*
- Enveloppes *inf* et *sup* de ces *m* estimations
- Si *K** se trouve entre ces 2 enveloppes, accepter H(0) (ici, niveau *10%*)

On peut aussi comparer les *K** à πh^2, valeur théorique de *K* pour un PPP.

Cette méthode décrit le principe du *Bootstrap paramétrique*.

Les 156 pins d’une forêt finlandaise

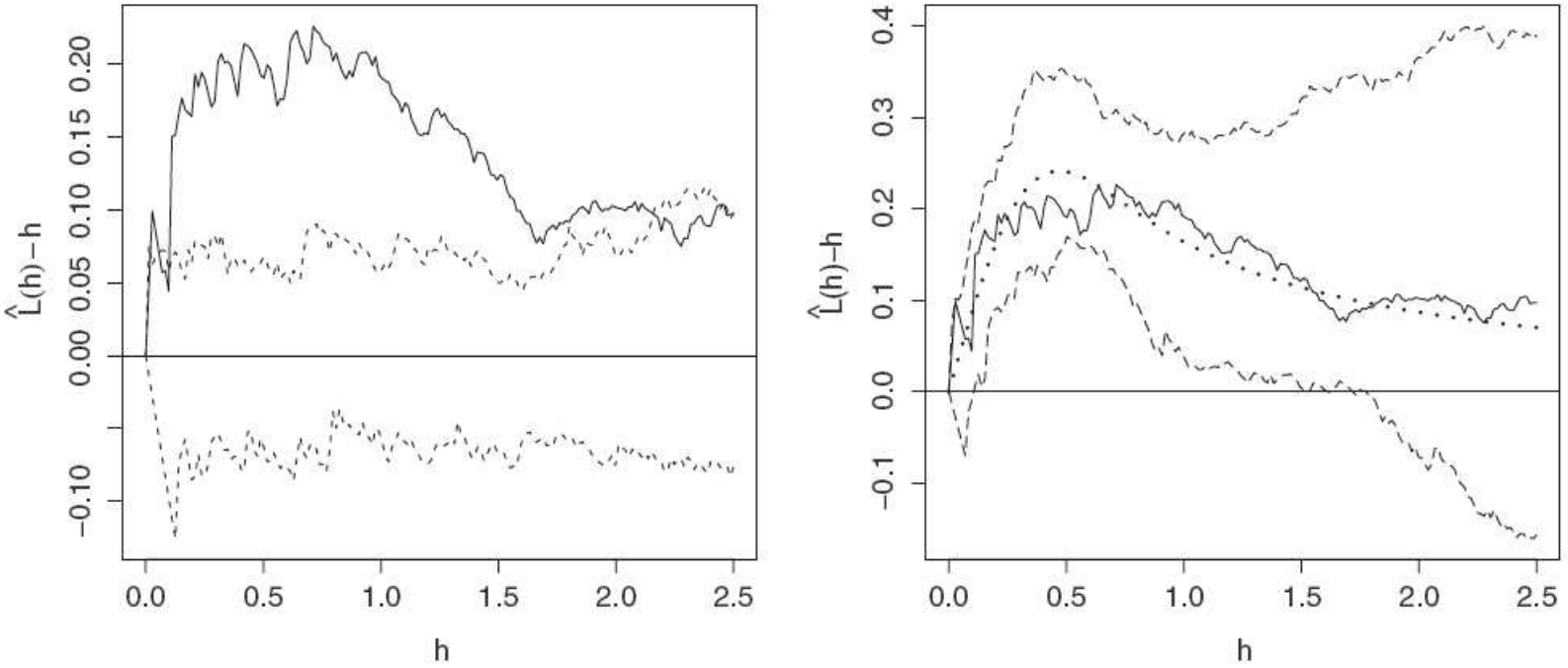
(finpines)



« Indépendance H(0) » contre « Neyman-Scott »

(données *finpines)*

- En continu, le graphe estimé de $h \rightarrow L(h) - h$ (=0 si (H(0)) pour x
- À gauche : bande de confiance pour *m=40* simulations *x** sous H(0)
- À droite : bande sous l'alternative N–S, avec en pointillé la courbe h→K(h) théorique pour les paramètres de N–S estimés.



spatstat : le package ***R*** pour les PP spatiaux

(spatial PP analysis, model fitting, simulation, …)

- ***Anova.ppm*** : déviance (s) entre deux ou plus que deux modèles
- ***Jest*** : estimation (empirique) de l'indicateur J du caractère (J=1) PPP ou non
- ***Kest*** : idem pour la fonction moment réduit d'ordre 2, K
- ***nearest.neighbour*** : distances aux ppv
- ***ppm*** : ajuste un model de PP à des données,
- ***rmh.ppm*** : simulation par Metropolis-Hastings (mh) d'un modèle de PP,
- ***rpoispp*** : simulation d'un PPP hogène ou non)
- Données : ***cells, finpines***, …..